

Andreas Schäfer

Diss. Frankfurt am Main

Q.U.

1984

DIE PARITÄTSVERLETZUNG IM CÄSIUM-ATOM
ALS BEISPIEL FÜR SYSTEME MIT GEBROCHENER SYMMETRIE

Inaugural - Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik
der
Johann Wolfgang Goethe - Universität
zu Frankfurt am Main

von
Andreas Schäfer
aus Frankfurt am Main

Frankfurt am Main

1985

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereiches Physik
der Johann-Wolfgang-Goethe - Universität
zu Frankfurt am Main

Dekan : Prof.Dr.B.Lüthi

Leiter der Arbeit : Prof.Dr.B.Müller

Erstgutachter : Prof.Dr.B.Müller

Zweitgutachter : Prof.Dr.W.Greiner

Tag der mündlichen Prüfung : 22.5.1985

INHALT

I. Einleitung und Problemstellung	3
I.1. Vereinheitlichte Feldtheorien und Symmetrien	5
I.2. Das Glashow-Salam-Weinberg Modell	7
I.3. Paritätsverletzung in schweren Atomen	27
II. Die theoretische Behandlung des Problems	37
II.1. Symmetrieverletzung in der Dirac- Theorie	39
II.1.1. Die Lorentzgruppe und P, T und PT	39
II.1.2. Diskrete Symmetrien und die Dirac-Gleichung	45
II.2. Die paritätsverletzende Dirac-Gleichung	59
II.2.1. Herleitung des Zusatzterms	59
II.2.2. Lösungsansatz und Asymptotik	65
II.3. Die Elektron- Elektron- Wechselwirkung	75
II.3.1. Das elektromagnetische HF- Potential	75
II.3.2. Die e-e-Wechselwirkung durch neutrale Ströme	92
II.4. Die Elektron- Photon- Wechselwirkung	101
II.4.1. Eichabhängigkeit von HF-Rechnungen	101
II.4.2. Das E1- und M1- Matrixelement	112
II.5. Korrekturen höherer Ordnung	117
II.6. Das elektrische Dipolmoment von Atomen	129
III. Die numerische Behandlung des Problems	137
III.1. Gewöhnliche Differentialgleichungen	139
III.1.1. Das Matching-Verfahren	142
III.1.2. Die Berechnung der Energiekorrektur	147
III.2. Hartree- und Hartree-Fock- Gleichungen	151
IV. Die Ergebnisse der HF-Rechnung für Cäsium	157
V. Starke CP-Verletzung im MIT- Bag- Modell	173
V.1. Der feldtheoretische Hintergrund	175
V.2. Die Bag-Wellenfunktionen	180
V.3. Das elektrische Dipolmoment des Neutrons	187

Anhänge

Literaturangaben

Lebenslauf

I. EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG

Zu den wichtigsten theoretischen Entwicklungen des letzten Jahrzehnts gehört mit Sicherheit die Formulierung von vereinheitlichten Feldtheorien. Das mit Abstand erfolgreichste dieser Modelle ist bisher das Glashow-Salam-Weinberg Modell (im folgenden abgekürzt durch GSW- Modell) der elektromagnetischen und schwachen Wechselwirkung (Gl61,Sl64,We67) . Die Vorhersagen dieses Modells sind durch viele Hochenergie- Experimente hervorragend bestätigt worden. Im Niederenergiebereich hingegen gibt es nur wenige Experimente, nämlich diejenigen an schweren Atomen, denen eine recht große Bedeutung zukommt, da sie komplementäre Tests liefern. Diese Experimente machen sich zunutze, daß das GSW-Modell zu jedem Prozess der Quantenelektrodynamik (QED) einen paritätsverletzenden Zusatzbeitrag vorhersagt. Dieser Beitrag beschreibt die Wechselwirkung durch neutrale Vektorbosonen Z^0 . Ganz allgemein gesprochen sagen alle vereinheitlichenden Feldtheorien die Existenz jeweils spezifischer Symmetrie- oder Erhaltungssatz verletzender Zusatzwechselwirkungen voraus. (So sagen z.B. die Grand- Unified- Theorien (GUT) der vereinheitlichten Beschreibung der elektromagnetischen, schwachen und Farb- Wechselwirkung die Verletzung der Baryonenzahl, d.h. den Zerfall des Protons vorher ;Ge74,We79 .) Die Aufgabe dieser Arbeit ist es nun zum Vergleich mit einem speziellen Experiment an Cäsium die theoretische Vorhersage im Rahmen des GSW-Modells zu berechnen und den Rechengang dabei so allgemein zu formulieren, daß er auch die Berechnung anderer Symmetrie- und Erhaltungssatz verletzender Effekte gestattet. So wird parallel zu jedem Schritt diskutiert wie das analoge Vorgehen für andere Probleme zu erfolgen hat. Außerdem werden wir zwei dieser weiterführenden Anwendungsmöglichkeiten in dieser Arbeit explizit vorführen, um die Vielfalt der behandelbaren Effekte zu illustrieren. In dieser Einführung werden wir zunächst einige feldtheoretische Grundlagen er-

läutern und insbesondere den Zusammenhang zwischen Vereinheitlichung und Symmetriebrechung darstellen. Danach werden wir die Ergebnisse der Experimente zum Test des GSW-Modells im allgemeinen und die für diese Arbeit wichtigen Experimente von M.A.Bouchiat et al. (Bou82,Bou84a) im besonderen diskutieren.

1.1. VEREINHEITLICHE FELDTHEORIEN UND SYMMETRIEN

Auch eine stark zusammenfassende Darstellung des Glashow- Salam- Weinberg Modells und weiterführender Ansätze würde den Rahmen dieser Einleitung sprengen. Für eine ausführliche Darstellung sei auf W.Greiner, A.Schäfer: Theoretische Physik: 'Eichtheorien' verwiesen. Hier wollen wir nur einige für das folgende wichtige Zusammenhänge erläutern.

Die wesentlichste Eigenschaft solcher 'vereinheitlichenden' Theorien ist, daß Teilchen, die bisher als voneinander unabhängig beschrieben wurden, nun als verschiedene Zustände ein und desselben fundamentalen 'Teilchens' erscheinen. So unterliegt das Neutrino ν_e nur der schwachen Wechselwirkung, während das Elektron sowohl schwach als auch elektromagnetisch wechselwirkt. Diese beiden Teilchen werden nun vom GSW-Modell als die beiden Komponenten eines Teilchens, des Leptons Nummer 1 beschrieben. In analoger Weise werden in den sogenannten Grand Unified Theorien (GUT) Neutrinos, Elektronen, up-Quarks und down-Quarks als verschiedene Aspekte eines einzigen Teilchens, des Lepto-Quarks Nummer 1 betrachtet. Es ist eine weitere Eigenschaft dieser Modelle, daß sie die Existenz einer jeweils spezifischen Anzahl von sogenannten Vektorbosonen vorhersagt. Es ist der Austausch dieser Teilchen, der im gewohnten Sprachgebrauch als elektromagnetische, schwache oder Farb- Wechselwirkung bezeichnet wird. Entscheidend ist nun, daß die vereinheitlichenden Theorien die Existenz von solchen Vektorbosonen postulieren, für die die entsprechenden Wechselwirkungen noch nicht beobachtet wurden. Dadurch werden diese Theorien experimentell überprüfbar. Besonders einfach und interessant sind solche Tests, wenn diese neuen Wechselwirkungsarten Symmetrien oder Erhaltungssätze verletzen, die von den bisher bekannten Prozessen erhalten wurden. So sagt das GSW-Modell neben den W^+ und W^- Bosonen, den Teilchen der gewöhnlichen schwachen Wechselwirkung, und dem Photon auch die Existenz eines Z^0 - Bosons und einer entspre-

chenden neuen Wechselwirkungsart voraus. Diese bezeichnet man als Wechselwirkung durch 'neutrale Ströme'. Genauer gesagt ist es nicht die Entdeckung der schwachen Ströme an sich, die als Bestätigung des GSW-Modells gewertet werden kann, denn neutrale Ströme werden auch von vielen anderen Theorien vorhergesagt, sondern es ist die experimentelle Bestimmung der einzelnen Kopplungskonstanten. So sagt das GSW-Modell genau voraus in welcher Weise das Z^0 an Elektronen und Nukleonen koppelt. Diese Kopplungen besitzen jeweils einen vektoriellen und einen axialvektoriellen Anteil und sind deswegen paritätsverletzend. Einige der Konsequenzen dieser paritätsverletzenden Zusatzwechselwirkung für die Atomphysik wollen wir in dieser Arbeit berechnen.

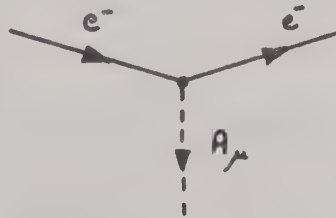
In analoger Weise sagen die GUT die Existenz von neuen Vektorbosonen voraus, deren Kopplung an die Quarks und Leptonen von einer Art ist, die den Protonenzerfall ermöglicht, also die Baryonenzahl-Erhaltung verletzt. Ganz allgemein kann man den Zusammenhang zwischen vereinheitlichenden Theorien und Symmetriebrechung so formulieren :

Vereinheitlichende Theorien führen zur Vorhersage neuer Wechselwirkungsarten, die bisher geltende Symmetrien (P-Symmetrie, d.h. Invarianz unter Raumspiegelungen; T-Symmetrie, d.h. Invarianz unter Zeitumkehr oder C-Symmetrie, d.h. Invarianz unter Ladungskonjugation) oder Erhaltungssätze (z.B. Baryonenzahl-Erhaltung oder Leptonenzahl-Erhaltung) verletzen können.

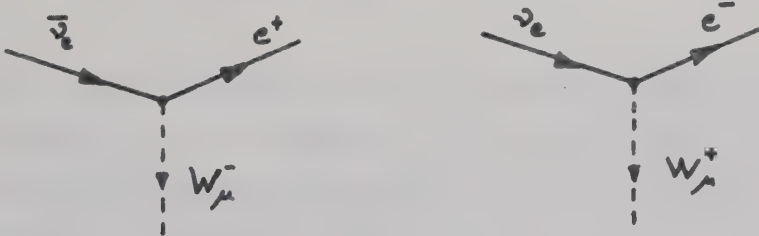
1.2 DAS GLASHOW-SALAM-WEINBERG MODELL

Das Glashow- Salam- Weinberg- Modell kombiniert die Beschreibung der schwachen Wechselwirkung als Austausch intermediärer Vektorbosonen und die Quantenelektrodynamik in einem Modell. Um eine renormierbare Quantenfeldtheorie zu erhalten, geschieht dies im Rahmen einer Eichtheorie. Der erste Schritt zur Konstruktion des GSW-Modells ist folglich die Wahl einer Eichgruppe. Diese Wahl orientiert sich an den Eigenschaften der zu beschreibenden Teilchen. Dies sind zuerst einmal die Vektorbosonen der elektromagnetischen und schwachen Wechselwirkung:

A_μ für die elektromagnetische Wechselwirkung



W^+ und W^- für die schwache Wechselwirkung



Die zur Auswahl stehenden Eichgruppen, sogenannte Lie-Gruppen, werden im Rahmen einer umfassenden Klassifizierung durch eine Buchstaben- und Zahlenkombination bezeichnet. Zu jeder dieser Gruppen gehört eine bestimmte Anzahl von Größen, die als Generatoren bezeichnet werden. Diese Zahl entspricht der Anzahl der von der Eichtheorie beschriebenen Vektorbosonen. Die einfachste Gruppe, die die drei Felder A_μ ,

W_μ^+ und W_μ^- beschreiben kann ist die sogenannte SU(2) - Gruppe. Man könnte daher z.B. die Vektorbosonen als SU(2)-Tripletts betrachten

$$\begin{array}{ccc} W_\mu^- & A_\mu & W_\mu^+ \\ t_3 = -1 & t_3 = 0 & t_3 = +1 \end{array} \quad t = 1 \quad (1.1)$$

und die Leptonen als SU(2) - Dubletts.

$$\psi_e = \begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

Dieser Ansatz führt jedoch nicht auf die gewünschte Wechselwirkung. Die Ströme an die die Vektorbosonen koppeln, sind nämlich bei diesem Ansatz

$$\begin{aligned} j_\mu^A &= \bar{\psi}_e \gamma_\mu \tau_3 \psi_e = \bar{\nu}_e \gamma_\mu \nu_e - \bar{e} \gamma_\mu e \\ j_\mu^{W^+} &= \bar{\psi}_e \gamma_\mu \tau^+ \psi_e = \bar{\nu}_e \gamma_\mu e \\ j_\mu^{W^-} &= \bar{\psi}_e \gamma_\mu \tau^- \psi_e = \bar{e} \gamma_\mu \nu_e \end{aligned} \quad (1.3)$$

Da das Neutrino keine Ladung trägt, darf es jedoch nicht an das Photon koppeln. Ebenso weiß man, daß die Kopplung für die schwache Wechselwirkung nicht rein vektoriell ist, sondern eine Mischung aus Vektor- und Axialvektorkopplung. Genauer gesagt ist sie von der Form

$$j_\mu^{W^-} = \bar{e} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \nu_e ; \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

Man muß den Ansatz (1.1), (1.2) also modifizieren. Bei hinreichender Geschicklichkeit kann man sich eine ganze Reihe von Modifikationen einfallen lassen, die zu den richtigen Wechselwirkungstermen führen.

Die einfachste dieser Möglichkeiten führt zur Konstruktion des GSW-Modells.

Man postuliert die Existenz eines weiteren Vektorbosons Z^0 und betrachtet die Eichgruppe $SU(2) \times U(1)$. (Die Gruppe $U(1)$ hat einen Generator, so daß die zusammengesetzte Gruppe $SU(2) \times U(1)$ vier Generatoren besitzt, die den vier Vektorbosonen A_μ, W_μ^+, W_μ^- und Z^0 entsprechen.) Desweiteren nimmt man an, daß nur die linkshändigen Leptonen ein $SU(2)$ - Dublett bilden, währen die rechtshändigen Leptonen $SU(2)$ - Singulettts sind. Rechts- und linkshändig bezeichnet hierbei diejenige Komponenten der Felder $e(x)$ und $\nu_e(x)$ die man durch Anwendung der Projektionsoperatoren

$$P_{\pm} = \frac{1 \pm \gamma_5}{2} \quad (1.5)$$

erhält. (Man kann sich leicht überzeugen, daß $P_{\pm}$ tatsächlich ein Projektionsoperator ist, d.h. die Beziehungen $P_+ + P_- = 1$ und $P_{\pm}^2 = P_{\pm}$ erfüllt.)

Die Gruppenstruktur des GSW- Modells ist also die folgende:

Vektorbosonen :

$$\begin{array}{ccc} W_\mu^- & W_\mu^3 & W_\mu^+ \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \hline & & B_\mu \\ & & \bullet \end{array} \quad \begin{array}{c} SU(2) \\ \times \\ U(1) \end{array} \quad (1.6)$$

Hierbei sind W_μ^3 und B_μ orthonormale Linearkombinationen von Z_μ^0 und A_μ .

Leptonen :

$$\begin{pmatrix} \nu_L \\ e_L \end{pmatrix} \text{ ist ein } SU(2)\text{-Dublett} \quad (1.7)$$

$$e_L = P_+ e \quad \nu_L = P_+ \nu_e$$

e_R ist ein $SU(2)$ - Singulett

mit

$$\psi_L = \frac{1 + \gamma_5}{2} \psi \quad \psi_R = \frac{1 - \gamma_5}{2} \psi \quad (1.8)$$

In diesen Gleichungen und im folgenden verwenden wir folgende Notation:

$e_L(x)$ ist der Dirac- Spinor, der das linkshändige Elektron beschreibt.

$e_R(x)$ ist der Dirac- Spinor, der das rechtshändige Elektron beschreibt.

$\nu_L(x)$ ist der Dirac- Spinor, der das linkshändige Neutrino beschreibt.

Bisher wurden nur linkshändige Neutrinos beobachtet. Sollte sich eines Tages zeigen, daß es auch rechtshändige Neutrinos gibt, könnte man sie jedoch problemlos in das GSW- Modell einbauen. Um die Bedeutung dieses rechtshändigen Neutrinos zu verstehen muß man wissen, daß jedes massive Dirac-Teilchen sowohl eine linkshändige als auch eine rechtshändige Komponente besitzt. Der Massenterm der Dirac- Gleichung lautet nämlich

$m (\psi_L^\dagger \psi_R + \psi_R^\dagger \psi_L)$. Er koppelt links und rechtshändige Teilchen miteinander.

$$\begin{aligned} m \psi^\dagger \gamma_0 \psi &= m (\psi_L^\dagger + \psi_R^\dagger) \gamma_0 (\psi_L + \psi_R) \\ &= m (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) + \\ &\quad + m (\psi_L^\dagger \gamma_0 \psi_R + \psi_R^\dagger \gamma_0 \psi_L) \\ &= m (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\text{mit} \quad \psi_L^\dagger \gamma_0 \psi_L = \psi^\dagger P_+ \gamma_0 P_+ \psi = \psi^\dagger \gamma_0 P_- P_+ \psi = 0$$

$$\text{und} \quad \psi_R^\dagger \gamma_0 \psi_R = \psi^\dagger P_- \gamma_0 P_- \psi = 0$$

Daher ist die Frage nach der Existenz eines rechtshändigen Neutrinos gekoppelt mit dem Problem der Neutrinomasse. Dieser Zusammenhang läßt sich auch anschaulich verstehen, wenn man nichtrelativistische Teilchen betrachtet. Für diese gilt, daß bei rechtshändigen Teilchen der Spin in Richtung der Bewegungsrichtung zeigt und bei linkshändigen entgegengesetzt. Nehmen wir nun an, daß wir ein rechtshändiges Teilchen beobachten, so gibt es ein anderes Bezugssystem von dem aus gesehen dieses Teilchen linkshändig ist. Führt man nämlich eine Galileitransformation in ein System, das sich in Richtung unseres Teilchens aber schneller als dieses bewegt, durch, so erscheint von diesem System aus die Bewegungsrichtung des Teilchens umgekehrt, während die Orientierung des Spins gleichbleibt.

Würde man nachweisen, daß das Neutrino eine nicht verschwindende Masse hat, so hätte man damit gleichzeitig die Existenz eines ν_R gezeigt. Nach diesen Vorbemerkungen wollen wir das GSW-Modell nun genauer beschreiben. Für eine Feldtheorie bedeutet dies, daß man die präzise Form der Lagrangedichte angeben muß. Wir beginnen mit dem Anteil, der die Dynamik der Vektorfelder bei Vernachlässigung der Ankopplung an die Fermionen und Higgs-Bosonen beschreibt.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{VB}} = & -\frac{1}{4} \left(\partial_\mu W_\nu^i - \partial_\nu W_\mu^i + g f_{ijk} W_\mu^j W_\nu^k \right) \cdot \\ & \cdot \left(\partial^\mu W^{i\nu} - \partial^\nu W^{i\mu} + g f_{ijk} W^{j\mu} W^{k\nu} \right) \\ & - \frac{1}{4} \left(\partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu \right) \left(\partial^\mu B^\nu - \partial^\nu B^\mu \right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

$i, j, k = 1, 2, 3$

Der erste Term ist die freie Lagrangedichte des SU(2)- Eichfeld-Tripletts, der zweite Term ist diejenige des U(1)- Eichfeldes und hat exakt die gleiche Struktur wie der Term $-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ in der Lagrangedichte der gewöhnlichen QED. Dies ist auch klar, da die QED ebenfalls eine Eichtheorie mit der Eichgruppe U(1) ist. Im ersten Term tritt ein Zusatzbeitrag auf, der die Selbstwechselwirkung der SU(2)- Eichfelder beschreibt. Die relative Stärke der verschiedenen Selbstwechselwirkungs- Arten wird durch die Strukturkonstanten der jeweiligen Gruppe f_{ijk} gegeben, die absolute Stärke skaliert mit g . In unserem Fall, d.h. für die SU(2) gilt einfach

$$f_{ijk} = \epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{falls } i,j,k \text{ zyklische Permutation von } 1,2,3 \\ -1 & \text{falls } i,j,k \text{ antizyklische Permutation von } 1,2,3 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.11)$$

Als zweites betrachten wir denjenigen Beitrag zur Lagrangedichte, der die Dynamik der Leptonenfelder beschreibt.

$$\mathcal{L}_L(x) = (\bar{\nu}_L(x), \bar{e}_L(x)) \cdot \gamma^\mu \cdot \left(i \partial_\mu + g \frac{\hat{\tau}^i}{2} W_\mu^i(x) - g' \frac{\hat{Y}}{2} B_\mu(x) \right) \cdot \begin{pmatrix} \nu_L(x) \\ e_L(x) \end{pmatrix} + \quad (1.12)$$

$$+ \bar{e}_R(x) \cdot \gamma^\mu \cdot \left(i \partial_\mu - g' \frac{\hat{Y}}{2} B_\mu(x) \right) e_R(x)$$

(τ^i sind die Paulimatrizen. Sie wirken auf die Zweiervektoren $(\nu_L, e_L)^t$, während die Matrizen γ^μ auf die unterdrückten Spinorindizes der Felder $e_L(x), e_R(x)$ und $\nu_L(x)$ wirken.)

Dieser Ausdruck hat eine recht komplizierte Struktur, die wir im folgenden erläutern wollen.

1.) Die GSW- Theorie ist eine Eichtheorie, d.h. sie muß invariant sein unter einer beliebigen lokalen $SU(2) \times U(1)$ - Eichtransformation. Diese wird definiert durch

$$U(x) = e^{i(g \vec{v}(x) \cdot \vec{\tau} - g' \varphi(x) \hat{y})}$$

$$e_L(x) \longrightarrow U(x) e_L(x) \quad ; \quad \nu_L(x) \longrightarrow U(x) \nu_L(x)$$

$$e_R(x) \longrightarrow U(x) e_R(x) \tag{1.13}$$

$$B_\mu(x) \longrightarrow B_\mu(x) + \partial_\mu \varphi(x)$$

$$\vec{\tau} \cdot \vec{W}_\mu(x) \longrightarrow U(x) \vec{\tau} \cdot \vec{W}_\mu(x) U^{-1}(x) - i U(x) \partial_\mu U^{-1}(x)$$

2.) Wir haben schon gesehen, daß die $U(1)$ - Gruppe formal völlig äquivalent zur gewöhnlichen QED behandelt werden muß. Dementsprechend tritt in den Gleichungen (1.12) und (1.13) ein $U(1)$ - Ladungsoperator y auf. Die Felder ν_L, e_L und e_R müssen Eigenzustände zu diesem y sei, jedoch sind die Eigenwerte völlig unbekannt. Bei einem systematischen Vorgehen müßte man sie als freie Parameter behandeln und nachher derart anpassen, daß man den gewünschten Ausdruck für den elektromagnetischen Teilchenstrom erhält. Da es uns hier nur um eine kurze Darstellung des GSW- Modells geht, nehmen wir das Ergebnis dieses Vorgehens vorweg und setzen

$$y_i = 2 (q_i - t_{3i}) \tag{1.14}$$

mit y_i : Eigenwert von y für das i -te Teilchen

(Diese Größe bezeichnet man als 'schwache Hyperladung')

q_i : gewünschte elektrische Ladung des Teilchens i

$t_{3,i}$: Eigenwert des i -ten Teilchens bezüglich $\frac{1}{2}\tau_3$

(Diese Größe bezeichnet man als 3.Komponente des 'schwachen Isospins')

Für die von uns betrachteten Felder ergeben sich demnach die in Tabelle 1 zusammengefaßten Werte.

	t_3	q	Y
e_R	0	-1	-2
e_L	$-\frac{1}{2}$	-1	-1
ν_L	$\frac{1}{2}$	0	-1
u_L	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
u_R	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$
d_L	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
d_R	0	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$

Tab.1 Schwacher Isospin und schwache Hyperladung der Fermionen

In diese Tabelle haben wir auch schon die entsprechenden Werte für die up und down Quarks aufgenommen. Die Quarks werden völlig symmetrisch zu den Leptonen e und ν_e behandelt, mit dem einzigen Unterschied, daß hier auch ein rechtshändiges up- Quark auftritt, da die up-Quarks ja nicht masselos sind.

$$\begin{pmatrix} u_L(x) \\ d_L(x) \end{pmatrix} \quad SU(2) - \text{Doublet}$$

(1.15)

$$u_R(x), d_R(x) \quad SU(2) - \text{Singletts}$$

Der zu (1.12) analoge Beitrag zur Lagrangedichte lautet dann :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_Q(x) = & (\bar{u}_L(x), \bar{d}_L(x)) \cdot \gamma^\mu \cdot \left(i \partial_\mu + \right. \\
& \left. + g \frac{\hat{\tau}^i}{2} W_\mu^i(x) - g' \frac{\hat{Y}}{2} B_\mu(x) \right) \cdot \begin{pmatrix} u_L(x) \\ d_L(x) \end{pmatrix} + \\
& + \bar{u}_R(x) \gamma^\mu (i \partial_\mu - g' \frac{\hat{Y}}{2} B_\mu(x)) u_R(x) \\
& + \bar{d}_R(x) \gamma^\mu (i \partial_\mu - g' \frac{\hat{Y}}{2} B_\mu(x)) d_R(x)
\end{aligned}
\tag{1.16}$$

Man beachte, daß wir in (1.16) die gleichen Kopplungskonstanten verwendet haben wie in Gleichung (1.12). Dies ist nicht selbstverständlich. So könnte man auch eine Eichtheorie formulieren, in der die Leptonenfelder sich mit

$$e \quad i [g \vec{\tau}(x) \cdot \vec{E} + g' \varphi(x) \hat{Y}]$$

und die Quarkfelder mit

$$e \quad i [\tilde{g} \vec{\tau}(x) \cdot \vec{E} + g' \varphi(x) \hat{Y}]$$

transformieren. Gerade diese Freiheit haben wir uns ja für die U(1)-Transformationen zunutze gemacht, indem wir die y-Ladung eingeführt haben, was äquivalent ist zur Wahl von unterschiedlichen Werten von g' für die verschiedenen Felder. Die Aussage, daß Quarks und Leptonen in gleicher Weise an die SU(2)-Eichfelder koppeln, d.h. daß $\tilde{g}$ gleich g ist, ist also nicht trivial. Diese Gleichheit wird von der sogenannten 'Universalitäts-Hypothese' postuliert. Ein experimenteller Test dieser Hypothese ist nicht einfach, da man ja nie eine Wechselwirkung mit einem freien Quark sondern immer nur mit einem ganzen Hadron beobachten kann. Um von der Quark-Kopplungskonstante zur Hadron-Kopplungskonstante zu gelangen, muß man diese im allgemeinen renormieren. Das heutige Verständnis dieser komplexen Zusammenhänge ist etwa das folgende :

1.) 'Universalität' gilt, d.h. $g = g$.

2.) Der vektorielle Anteil des hadronischen Teilchenstroms ist einfach die Summe der Quark- Vektorströme, d.h. die Renormierungskonstante für den Vektoranteil ist einfach 1. Diese Aussage wird als Hypothese des erhaltenen Vektorstromes (CVC = Conserved Vector Current) bezeichnet. Der axialvektorielle Anteil hingegen wird renormiert und zwar mit dem Faktor 1.250 ± 0.009 , d.h. der hadronische Axialvektorstrom ist 1.250 mal der Summe der axialvektoriellen Quark-Teilchenströme. Es ist möglich, diesen Faktor im Rahmen des Bag- Modells zu berechnen (DGa75). In diesem Modell ist er eine Folge der spezifischen Form der Quark- Wellenfunktionen. Der Vollständigkeit halber sei aber erwähnt, daß sich dieser Faktor auch mit Hilfe der sogenannten PCAC- Hypothese (Partially Conserved Axial vector Current) als Renormierungseffekt verstehen läßt. Dies ist ein Modell, das keine Annahmen über die innere Struktur der Hadronen macht, und annimmt, daß die starke Wechselwirkung durch Pionenaustausch dominiert wird.

Es kommt noch eine weitere Schwierigkeit hinzu. Außer den bisher besprochenen Dirac- Teilchen gibt es noch weitere schwerere Leptonen und Quarks. Diese kann man zu 'Familien' ordnen, deren Struktur bezüglich der $SU(2) \times U(1)$ - Gruppe genau der der e, ν_e, u und d 'Familie' entspricht. So finden sich z.B. in der zweiten Familie das charm- und das strange- Quark. Aus den Experimenten zur schwachen Wechselwirkung weiß man jedoch, daß auch das up- und strange- Quark miteinander koppeln. Um dies zu beschreiben muß man annehmen, daß die Komponenten der $SU(2)$ Dubletts keine flavor- Eigenzustände sondern Linearkombinationen verschiedener Quarks sind. Genauer gesagt muß man mindestens annehmen, daß das down- und das strange- Quark miteinander gemischt werden.

$$SU(2) - \text{Doublets} : \begin{pmatrix} u_L(x) \\ \tilde{d}_L(x) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_L(x) \\ \tilde{s}_L(x) \end{pmatrix}$$

$$SU(2) - \text{Singulets} : u_R(x), \tilde{d}_R(x), c_R(x), \tilde{s}_R(x) \quad (1.17)$$

$$\tilde{d}(x) = \cos \vartheta_c \cdot d(x) + \sin \vartheta_c \cdot s(x)$$

$$\tilde{s}(x) = -\sin \vartheta_c \cdot d(x) + \cos \vartheta_c \cdot s(x)$$

Der auftretende Mischungswinkel wird als 'Cabbibo-Winkel' bezeichnet. Sein numerischer Wert bestimmt sich zu (DaB82)

$$\cos \vartheta_c = 0.9737 \pm 0.0025 \quad (1.18)$$

(Die Einführung jeder neuen Generation von Quarks gestattet die Annahme weitere Mischwinkel. Diese Komplikationen sind aber für uns hier unwichtig.)

Schließlich müssen wir noch den Anteil der Lagrangedichte diskutieren, der das Higgs-Feld beschreibt. Aus der Einführung dieses Higgs-Feldes und dem durch diesen Ansatz hervorgerufenen Mechanismus der spontanen Symmetriebrechung folgen die besonderen Eigenschaften des GSW- Modells, insbesondere seine Renormierbarkeit, die es vor allen früheren Ansätzen zur Beschreibung der schwachen Wechselwirkung auszeichnet. Diese grundlegenden Zusammenhänge sind jedoch nicht Thema dieser Arbeit. Auch eine genaue Analyse und Rechtfertigung der spontanen Symmetriebrechung kann in diesem Rahmen nicht gegeben werden, zumal uns eine restlos befriedigende Interpretation ihres physikalischen Inhalts bisher nicht bekannt ist. Wir wollen uns daher mit einer bloßen Aufzählung der technischen Vorgehensweise begnügen.

Man betrachtet ein Dublett komplexer Higgs-Felder

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

und die folgende Higgs-Lagrangedichte.

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_H(x) = & \left| \left(i \partial_\mu + g \frac{\hat{\tau}}{2} \cdot \vec{W}_\mu(x) - g' \frac{\hat{Y}}{2} B_\mu(x) \right) \Phi(x) \right|^2 \\
& - \frac{\lambda}{4} \left(\Phi^\dagger(x) \Phi(x) - \frac{v^2}{2} \right)^2 \\
& - f_1 \left[(\bar{\nu}_L(x), \bar{e}_L(x)) \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} e_R(x) + \right. \\
& \quad \left. + \bar{e}_R(x) (\varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x)) \cdot \begin{pmatrix} \nu_L(x) \\ e_L(x) \end{pmatrix} \right] \\
& - f_2 \left[(\bar{u}_L(x), \bar{d}_L(x)) \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} u_R(x) + \right. \\
& \quad \left. + \bar{u}_R(x) (\varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x)) \cdot \begin{pmatrix} u_L(x) \\ d_L(x) \end{pmatrix} \right] \\
& - f_3 \left[(\bar{u}_L(x), \bar{d}_L(x)) \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} d_R(x) + \right. \\
& \quad \left. + \bar{d}_R(x) (\varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x)) \cdot \begin{pmatrix} u_L(x) \\ d_L(x) \end{pmatrix} \right] \\
& - \dots
\end{aligned} \tag{1.20}$$

Für die Higgs-Felder wählt man $y=1$. Dementsprechend erhält man aus der Umkehrung von (1.14) für die elektrischen Ladungen:

$$\begin{aligned}
\varphi_1 : \quad q &= \frac{1}{2} \gamma + t_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\
\varphi_2 : \quad q &= \frac{1}{2} \gamma + t_3 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0
\end{aligned} \tag{1.21}$$

Das komplexe Feld Φ_1 beschreibt also die beiden geladenen Skalarfelder:

$$\varphi^+ = \varphi_1 \quad ; \quad \varphi^- = \varphi_1^* \quad (1.22)$$

Der Vakuumerwartungswert der Feld- Energiedichte

$$\frac{\lambda}{4} \left(\Phi^\dagger(x) \Phi(x) - \frac{v^2}{2} \right)^2$$

ist minimal für

$$|\langle 0 | \Phi | 0 \rangle|^2 = \frac{v^2}{2} \quad (1.23)$$

Man entwickelt nun das Higgs- Feld um diesen Wert, indem man

$$\Phi(x) = \tilde{\Phi}(x) + \frac{v}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad ; \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (1.24)$$

in die Lagrangedichte $\mathcal{L}_H$ einsetzt. Hierdurch gewinnt man Massenterme für die Eichfelder, die Leptonen und die Quarks. Allerdings muß die Massenmatrix der Eichfelder erst noch diagonalisiert werden. Dies geschieht durch die orthogonale Transformation

$$\begin{aligned} W_\mu^3 &= -\sin \vartheta_w \cdot A_\mu + \cos \vartheta_w \cdot Z_\mu \\ B_\mu &= \cos \vartheta_w \cdot A_\mu + \sin \vartheta_w \cdot Z_\mu \end{aligned} \quad (1.25)$$

Der auftretende Mischungswinkel ϑ_w wird als Weinbergwinkel bezeichnet.

Man kann nun das durch Gleichung (1.25) definierte Feld A_μ , das masselos bleibt, mit dem elektromagnetischen Viererpotential identifizieren. Das massive Feld Z_μ^0 beschreibt dann ein neues, ursprünglich hypothetisches Teilchen, eben das neutrale Vektorboson.

Die für das folgende relevanten Teile der auf diese Weise umgeformten Gesamt- Lagrangedichte sind dann :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{GSW}} &= \mathcal{L}_{\text{VB}} + \mathcal{L}_{\text{L}} + \mathcal{L}_{\text{Q}} + \mathcal{L}_{\text{H}} = \\
&= -\frac{1}{4} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ie (W_\mu^- W_\nu^+ - W_\mu^+ W_\nu^-))^2 \\
&\quad - \frac{1}{2} \left| \partial_\mu W_\nu^+ - \partial_\nu W_\mu^+ - ie (W_\mu^+ A_\nu - W_\nu^+ A_\mu) + \right. \\
&\quad \quad \left. + ig \cos \vartheta_w (W_\mu^+ Z_\nu - W_\nu^+ Z_\mu) \right|^2 \\
&\quad - \frac{1}{4} \left| \partial_\mu Z_\nu - \partial_\nu Z_\mu + ig \cos \vartheta_w (W_\mu^- W_\nu^+ - W_\nu^- W_\mu^+) \right|^2 \\
&\quad + \bar{e} (i\not{\partial} - m_e - e \not{A}) e \\
&\quad + \bar{\nu}_e (i\not{\partial}) \nu_e \\
&\quad + \bar{u} (i\not{\partial} - m_u + \frac{2}{3} e \not{A}) u \\
&\quad + \bar{d} (i\not{\partial} - m_d - \frac{1}{3} e \not{A}) d \\
&\quad + \dots \\
&\quad + \frac{g}{\sqrt{2}} W_\mu^+ (\bar{\nu}_e \gamma^\mu (1+\gamma_5) e + \bar{u} \gamma^\mu (1+\gamma_5) d \cdot \cos \vartheta_c \\
&\quad \quad + \bar{u} \gamma^\mu (1+\gamma_5) s \cdot \sin \vartheta_c + \dots) \\
&\quad + \frac{g}{\sqrt{2}} W_\mu^- (\bar{e} \gamma^\mu (1+\gamma_5) \nu_e + \bar{d} \gamma^\mu (1+\gamma_5) u \cdot \cos \vartheta_c + \\
&\quad \quad + \bar{s} \gamma^\mu (1+\gamma_5) u \cdot \sin \vartheta_c + \dots)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{g}{4 \cos \vartheta_w} Z_\mu \left(\bar{\nu}_e \gamma^\mu (1 + \gamma_5) \nu_e - \right. \\
& - \bar{e} \gamma^\mu (1 - 4 \sin^2 \vartheta_w + \gamma_5) e + \\
& + \bar{u} \gamma^\mu (1 - \frac{8}{3} \sin^2 \vartheta_w + \gamma_5) u - \\
& - d \gamma^\mu (1 - \frac{4}{3} \sin^2 \vartheta_w + \gamma_5) d + \dots \left. \right) \\
& + \frac{1}{2} M_w^2 W_\mu^+ W^{-\mu} + \frac{1}{2} M_z^2 Z_\mu Z^\mu
\end{aligned}$$

$$W_\mu^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (W_\mu^1 \pm i W_\mu^2) \quad (1.26)$$

mit

$$M_z = \frac{M_w}{\cos \vartheta_w} \quad (1.27)$$

Die Fermi- Konstante G und die elektrische Elementarladung e entsprechen folgender Kombination der GSW- Parameter :

$$e = g \sin \vartheta_w = g' \cos \vartheta_w \quad (1.28)$$

$$G = \frac{\sqrt{2}}{8} \frac{g^2}{M_w^2} \quad (1.29)$$

Mit Hilfe dieser Relationen lassen sich alle GSW- Parameter durch ϑ_w ausdrücken :

$$g' = \frac{e}{\cos \vartheta_w} \quad (1.30)$$

$$g = \frac{e}{\sin \vartheta_w} \quad (1.31)$$

$$M_w = \left(\frac{\sqrt{2} e^2}{8 G \sin^2 \vartheta_w} \right)^{1/2} \quad (1.32)$$

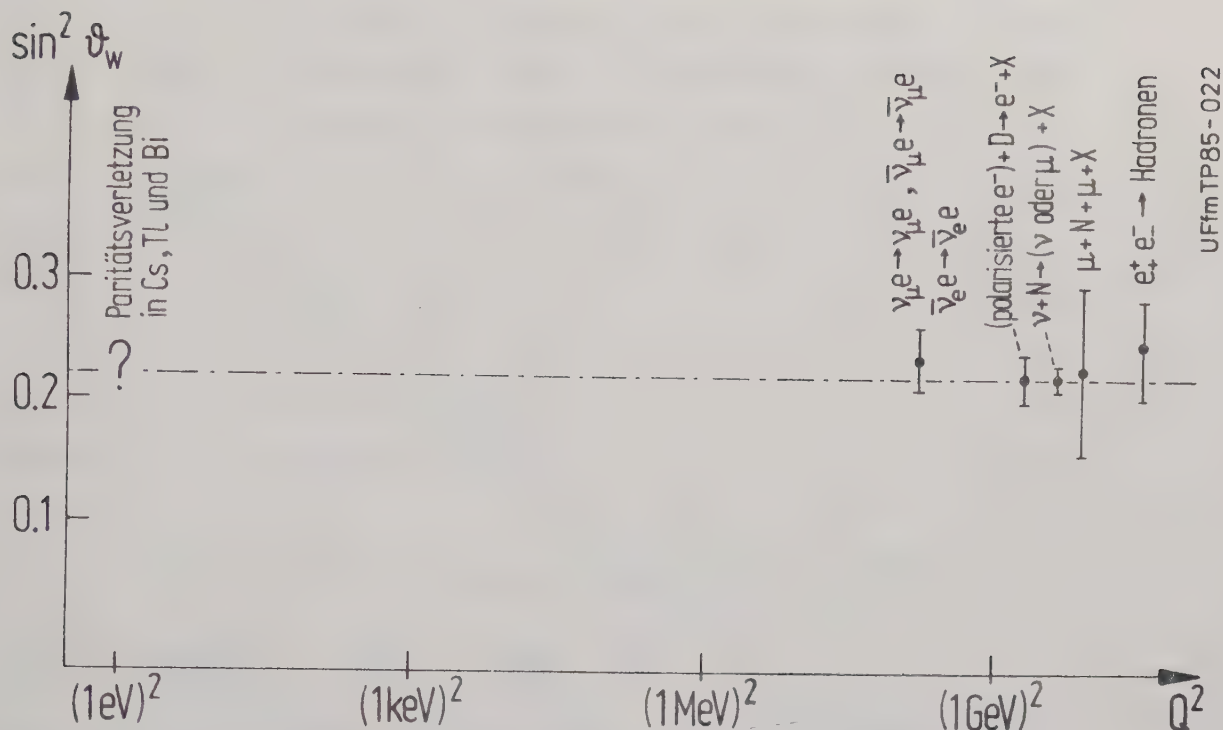
d.h. das GSW- Modell hat nur einen freien Parameter, nämlich eben ϑ_w . Dieser bestimmt die relative Stärke der verschiedenen Kopplungskonstanten. Um die GSW- Theorie zu testen, hat man im wesentlichen drei Wege verfolgt.

1.) Man hat versucht, die Existenz der postulierten Vektorbosonen direkt nachzuweisen. Dies ist 1983 tatsächlich am CERN gelungen (UA183). Man fand als numerischen Wert für die Massen:

$$M_w = 80.9 \pm 1.5 \frac{\text{GeV}}{c^2} \quad (1.33)$$

$$M_z = 95.6 \pm 1.4 \frac{\text{GeV}}{c^2}$$

2.) Man bestimmt die Effekte der schwachen Wechselwirkung durch neutrale Ströme in möglichst vielen, möglichst verschiedenen Experimenten und vergleicht die für $\sin^2 \vartheta_w$ erhaltenen Werte. In der folgenden Figur 1 sind einige der auf diese Art gewonnenen Ergebnisse zusammengefaßt. Q^2 ist hierbei das Quadrat des Impulsübertrags.



UFFm TP85-022

Fig.1: Experimente zum Test des GSW-Modells

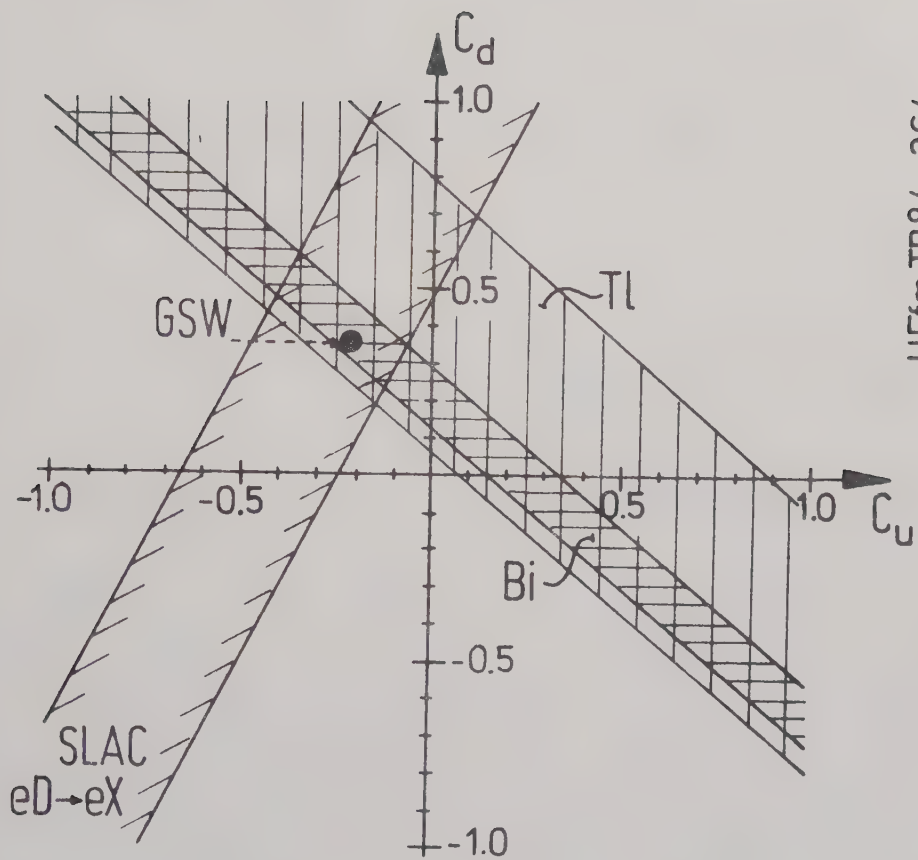
3.) Man macht einen möglichst allgemeinen Ansatz für die untersuchte Wechselwirkung und leitet aus der Analyse der Experimente Einschränkungen für die eingeführten Parameter her.

Den Experimenten an schweren Atomen kommt nun eine besondere Bedeutung zu. Einmal weil sie und das Stanford- Experiment : e^- (polarisiert) + D $\rightarrow$ e^- + X die einzigen Experimente sind, die die Elektron- Quark statt der Neutrino- Quark Wechselwirkung testen, vor allem aber weil sie die einzigen Experimente bei niedrigen Energien sind. Es ist nämlich problematisch, Ergebnisse von Hochenergie- Experimenten zu niedrigen Energien zu extrapolieren, da die Kopplungskon-

stanten in Quantenfeldtheorien grundsätzlich vom Energieübertrag abhängen. (Dies führt dazu, daß $\sin^2 \theta_w$ für Hochenergie- und Niederenergie- Experimente unterschiedlich zu wählen ist.) Es sei angemerkt, daß die Experimente an schweren Atomen und das Stanford- Experiment sich in geradezu idealer Weise ergänzen. Wir werden in Abschnitt II.2 besprechen, wie man aus der Elektron- Quark- Wechselwirkung in nicht-relativistischer Näherung die Elektron- Nukleon- Wechselwirkung erhalten kann. Dort werden wir auch ausführlich diskutieren, mit welchen Problemen diese Herleitung verbunden ist. Schiebt man diese Bedenken vorläufig beiseite, so läßt sich die Stärke der P- Verletzung durch zwei Parameter C_u und C_d parametrisieren. Dies sind die Vektor- Kopplungskonstanten zwischen den Quarks und dem Z^0 - Boson.

$$\mathcal{L}_{int} = \frac{-g}{2 \cos \theta_w} \left\{ C_u \bar{u}(x) \gamma_\mu u(x) + C_d \bar{d}(x) \gamma_\mu d(x) + \dots \right\} Z^\mu(x) \quad (1.34)$$

Die Experimente an Bi und Tl (Co80) ergeben zusammen mit dem Stanford- Experiment folgende Einschränkungen für C_u und C_d . Figur 2 zeigt, daß die beiden Experimente fast orthogonale Kombinationen von C_u und C_d testen und durch diese Komplementarität eine sehr genaue Eingrenzung der Quark- Kopplungsparameter ermöglichen.



UFfm TP84 - 364

Fig.2: Die Komplementarität der Experimente an schweren Atomen und mit polarisierten Elektronen.

1.3. PARITÄTSVERLETZUNG IN SCHWEREN ATOMEN

Für die Atomphysik bedeutet die Existenz der neutralen Ströme, daß die Elektronen mit dem Kern und miteinander nicht mehr nur virtuelle Photonen, sondern ebenfalls virtuelle Z^0 Bosonen austauschen. Betrachten wir zunächst die Elektron- Kern Wechselwirkung.

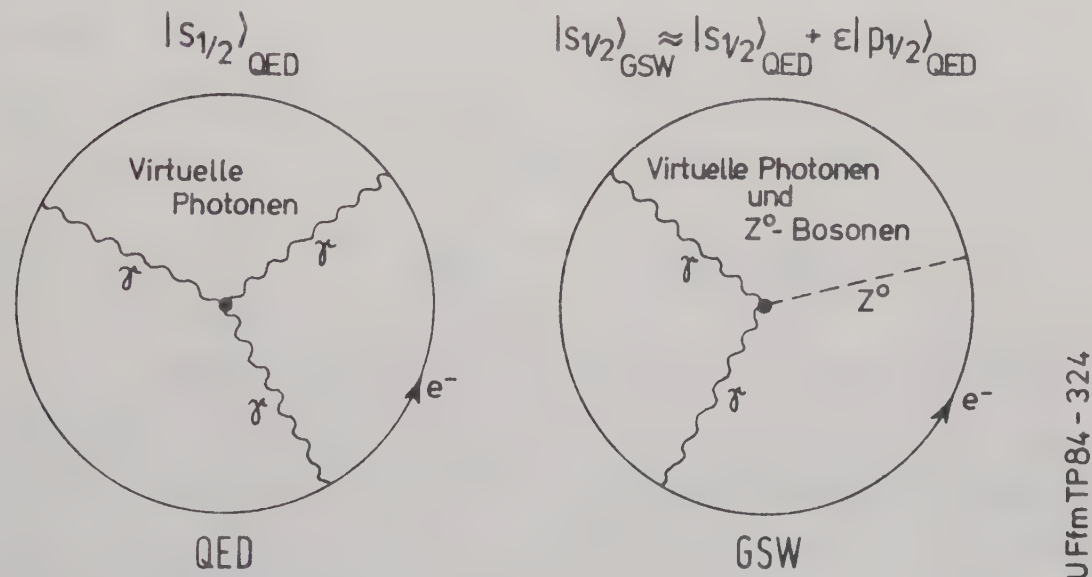


Fig.3: Die Mischung von s und p Zuständen durch Z^0 - Austausch

Da die elektromagnetische Wechselwirkung die Parität erhält, führt der Austausch virtueller Photonen zu Bindungszuständen guter Parität. Die hinzukommende schwache Wechselwirkung, die durch die Z^0 's vermittelt wird, verletzt die Parität. Daher gibt es keine Bindungszustände

mehr, die exakte Eigenzustände zum Paritätsoperator sind. Vielmehr enthält jeder Zustand eine kleine Beimischung mit jeweils anderem Paritätseigenwert. So wird zum Beispiel jeder $s_{\frac{1}{2}}$ Wellenfunktion ein kleiner Anteil einer $p_{\frac{1}{2}}$ Wellenfunktion beigemischt. Dies soll Fig.3 verdeutlichen. Hierbei bezeichnet $s_{\frac{1}{2}}^{\text{QED}}$ einen Zustand guter Parität, wie ihn die gewohnte QED liefert, und $s_{\frac{1}{2}}^{\text{GSW}}$ den entsprechenden, durch Einbeziehung neutraler Ströme modifizierten Zustand. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch neutrale Ströme führt, wie wir noch sehen werden, zu dem gleichen Mischungseffekt. Allerdings wird sich zeigen, daß ihre Rolle zu vernachlässigen ist. Hieraus folgt, daß die üblichen Multipol-Auswahlregeln für elektromagnetische Übergänge nicht mehr streng gelten. Während im Rahmen der QED zum Beispiel E1-Übergänge von einem s-Zustand in einen anderen s-Zustand verboten sind,

$${}_{\text{QED}} \langle n p_{1/2} | E1 | n' s_{1/2} \rangle_{\text{QED}} = 0 \quad (1.35)$$

sind im Rahmen des GSW-Modells solche Übergänge möglich.

$$\begin{aligned} {}_{\text{GSW}} \langle n s_{1/2} | E1 | n' s_{1/2} \rangle_{\text{GSW}} &= \\ &= \epsilon_n {}_{\text{QED}} \langle p_{1/2} | E1 | n' s_{1/2} \rangle_{\text{QED}} + \epsilon_{n'} {}_{\text{QED}} \langle n s_{1/2} | E1 | p_{1/2} \rangle_{\text{QED}} \quad (1.36) \\ &\neq 0 \end{aligned}$$

Somit kann im Rahmen des GSW-Modells ein Dipolübergang gleichzeitig einen E1- und einen M1-Beitrag besitzen. Dieses gleichzeitige Auftreten einer E1- und einer M1-Amplitude führt nun zu folgendem ungewöhnlichen Effekt, den man zum experimentellen Nachweis benutzt.

Das bei Übergängen mit nicht verschwindender E1- und M1-Amplituden emittierte Licht ist zirkular polarisiert.

$$(1.37)$$

Dies wollen wir im folgenden erklären. Hierzu schreiben wir den Elektron- Photon- Wechselwirkungsoperator

$$\overline{\psi}_f \gamma_\mu \hat{A}^\mu \psi_i \quad (1.38)$$

um, indem wir $\hat{A}^\mu$ nach Multipolen entwickeln. (Hierbei bezeichnen die Buchstaben e,m und l die elektrischen, magnetischen und longitudinalen Polarisationsrichtungen.)

$$\hat{A}^\mu = \sum_{L,M} \left\{ \hat{A}^\mu(e; L, M) + \hat{A}^\mu(m; L, M) + \hat{A}^\mu(l; L, M) \right\} \quad (1.39)$$

Wir betrachten einen Übergang mit einem reellen, transversalen Dipolphoton (d.h. $L=1$). Der Ausdruck (1.39) vereinfacht sich dadurch zu

$$\hat{A}^\mu = \sum_{M=-1}^1 \left\{ \hat{A}^\mu(e; 1, M) + \hat{A}^\mu(m; 1, M) \right\} \quad (1.40)$$

Wir wählen die zur Beschreibung von Strahlungsübergängen besonders geeignete Coulomb- Eichung (d.h. $\hat{A}^0=0$) und zerlegen die einzelnen Operatoren noch einmal in die Beiträge der verschiedenen Polarisationsrichtungen des Photons.

$$\vec{\hat{A}} = \sum_{M, \mu=-1}^1 \left\{ \vec{\hat{A}}(e; 1, M, \mu) + \vec{\hat{A}}(m; 1, M, \mu) \right\} \quad (1.41)$$

Mit den Beziehungen (2.208) und (2.212) aus Abschnitt II.4 folgt :

$$\begin{aligned}
\vec{\tilde{Q}}(m; 1, M, \mu) &= -j_1(\omega r) (-)^{1+M} \sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \mu & M-\mu & -\mu \end{pmatrix} \times \\
&\quad \times Y_1^{M-\mu} \vec{\xi}_\mu \\
\vec{\tilde{Q}}(e; 1, M, \mu) &= -\sqrt{\frac{1}{3}} j_2(\omega r) (-)^{1+M} \sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ \mu & M-\mu & -\mu \end{pmatrix} \times \\
&\quad \times Y_2^{M-\mu} \vec{\xi}_\mu + \\
&\quad + \sqrt{\frac{2}{3}} j_0(\omega r) (-)^{1+M} \sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ \mu & M-\mu & -\mu \end{pmatrix} Y_0^{M-\mu} \vec{\xi}_\mu
\end{aligned} \tag{1.42}$$

Ist nun sowohl ein E1- als auch ein M1- Übergang möglich, so erhält man zwei Beiträge zur Übergangsamplitude

$$\begin{aligned}
M_{fi}(\mu) &= \sum_{M=-1}^1 \left\{ \langle f | \vec{a} \cdot \vec{\tilde{Q}}(e; 1, M, \mu) | i \rangle + \right. \\
&\quad \left. + \langle f | \vec{a} \cdot \vec{\tilde{Q}}(m; 1, M, \mu) | i \rangle \right\} \\
&= \langle J_f, M_f | \vec{a} \cdot \vec{\tilde{Q}}(e; 1, M_f - M_i, \mu) | J_i, M_i \rangle + \\
&\quad + \langle J_f, M_f | \vec{a} \cdot \vec{\tilde{Q}}(m; 1, M_f - M_i, \mu) | J_i, M_i \rangle
\end{aligned} \tag{1.43}$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Photon mit der Polarisation μ emittiert wird, ist dann :

$$p(\mu) = |M_{fi}(\mu)|^2 \tag{1.44}$$

Aus diesen Werten berechnet sich der Grad an zirkularer Polarisation gemäß

$$P_{\text{circ}} = \frac{p(\mu=+1) - p(\mu=-1)}{p(\mu=+1) + p(\mu=-1)} \quad (1.45)$$

Wir gehen in Zähler und Nenner zu den reduzierten Matrixelementen über.

$$\begin{aligned} \langle J_f M_f | \vec{a} \cdot \vec{\hat{C}}_l(e; 1, M_f - M_i, \mu) | J_i M_i \rangle = \\ = (-)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & 1 & J_i \\ -M_f & M_f - M_i & M_i \end{pmatrix} \langle J_f || \vec{\hat{C}}_l(e; 1, M_f - M_i, \mu) \cdot \vec{a} || J_i \rangle \end{aligned}$$

$$= (-)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & 1 & J_i \\ -M_f & M_f - M_i & M_i \end{pmatrix} E 1(\mu)$$

$$\langle J_f M_f | \vec{a} \cdot \vec{\hat{C}}_l(m; 1, M_f - M_i, \mu) | J_i M_i \rangle =$$

$$= (-)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & 1 & J_i \\ -M_f & M_f - M_i & M_i \end{pmatrix} \langle J_f || \vec{a} \cdot \vec{\hat{C}}_l(m; 1, M_f - M_i, \mu) || J_i \rangle$$

(1.46)

$$= (-)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & 1 & J_i \\ -M_f & M_f - M_i & M_i \end{pmatrix} M 1(\mu)$$

Da die auftretenden $3j$ - Symbole in Zähler und Nenner gleich sind, kürzen sie sich heraus und wir erhalten :

$$P_{\text{circ}} = \left\{ |E1(\mu=+1) + M1(\mu=+1)|^2 - |E1(\mu=-1) + M1(\mu=-1)|^2 \right\} / \left\{ |E1(\mu=+1) + M1(\mu=+1)|^2 + |E1(\mu=-1) + M1(\mu=-1)|^2 \right\} \quad (1.47)$$

Wir werden diese Matrixelemente in Abschnitt 3.4 berechnen; das Ergebnis wird sein :

$$M1(\mu) = \epsilon_M i \operatorname{sign}(\mu) \cdot |M1(\mu)| \quad \mu = \pm 1 \quad (1.48)$$

$$E1(\mu) = \epsilon_E i |E1(\mu)| \quad \mu = \pm 1 \quad (1.49)$$

$$|\epsilon_M|, |\epsilon_E| = 1$$

Hieraus folgt nun aber :

$$P_{\text{circ.}} = \frac{(|E1| + |M1|)^2 - (|E1| - |M1|)^2}{(|E1| + |M1|)^2 + (|E1| - |M1|)^2} = \frac{2 |E1| |M1|}{|E1|^2 + |M1|^2} \approx \frac{2 |E1|}{|M1|} =: \delta \quad (1.50)$$

Im letzten Schritt haben wir angenommen, daß $M1$ sehr viel größer ist als $E1$. Experimentell mißt man nun nicht direkt den Grad zirkularer Polarisation des emittierten Lichts, sondern folgenden kollektiven Effekt. Man schickt linear- polarisiertes Laserlicht, das exakt die Frequenz des untersuchten Übergangs hat, durch eine Küvette, die mit dem Dampf des entsprechenden Elements gefüllt ist. Linear polarisiertes Licht kann man bekanntlich in zwei gleich starke Anteile rechts- und links- zirkular polarisierten Lichts zerlegen. Diese wechselwirken nun nach dem eben Gesagten unterschiedlich stark mit dem Dampf, d.h. die Refraktionsindizes für rechts- bzw. links- zirkular polarisiertes Licht sind unterschiedlich. Dies führt zu einer Drehung der Polarisationsrichtung des Laserlichts. Eine genaue Analyse zeigt, daß der Drehwinkel zu δ aus Gleichung (1.50) proportional ist. Außerdem ist er auch proportional zur Länge des in dem Gas zurückgelegten Weges. Dieses ermöglicht es, das Signal durch ein Spiegelsystem zu verstärken, das den Strahl viele Male durch die Küvette schickt. Trotzdem bleibt der zu messende Drehwinkel winzig; nämlich von der Größenordnung weniger Bogenminuten. Daher wird es nicht überraschen, daß diese Experimente, obwohl schematisch sehr einfach (siehe Fig.4), in der praktischen Durchführung ein Höchstmaß an Raffinesse erfordern. Eine schöne und verständliche Beschreibung der experimentellen Techniken findet man in (Bou84b). Cäsium erscheint für solche Experimente ganz besonders geeignet zu sein, da hier $\delta \sim 10^{-4}$ vergleichsweise sehr groß ist. Es zeigt sich jedoch, daß sich dieser Vorteil nicht voll ausnutzen läßt, da durch die kleine $M1$ - Intensität der interessierende kollektive Effekt durch die unvermeidlichen Hintergrundstörungen verhindert würde. Daher sah man sich genötigt, die Intensität des Paritäts- erlaubten Überganges künstlich zu erhöhen. Dies ist möglich indem man durch Anlegen eines externen elektrischen Feldes $E1$ - Stark Übergänge induziert. Man erhält dann eine Interferenz zwischen dem Paritäts- verletzenden $E1$ - Matrixelement und dem durch den Stark- Effekt induzierten Paritäts-

erhaltenden E1- Matricelement. Wir wollen die Einzelheiten diese Experiments hier nicht näher diskutieren, sondern uns der eigentlichen Aufgabe dieser Arbeit zuwenden, nämlich der Berechnung des Paritätsverletzenden E1 Matricelements.

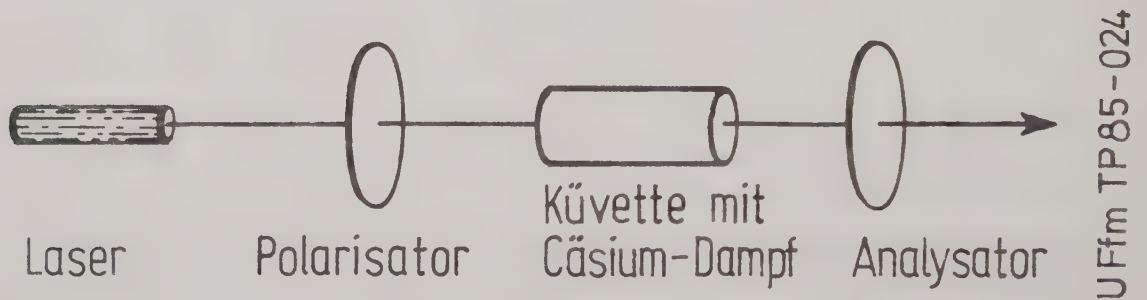


Fig.4: Prinzipskizze der Experimente an schweren Atomen.

II. DIE THEORETISCHE BEHANDLUNG DES PROBLEMS

II.1 SYMMETRIEVERLETZUNG IN DER DIRAC- THEORIE

In diesem Abschnitt wollen wir den Ursprung und die Bedeutung der diskreten Symmetrien näher beleuchten. Hierzu beginnen wir mit einer allgemeinen Analyse der Lorentz- Gruppe. Dies führt uns auf die diskreten Symmetrien P (Paritäts- Transformation oder Raumspiegelung) , T (Zeitspiegelung) und PT (simultane Raum- und Zeitspiegelung) . Bei der Beschäftigung mit relativistischen Quantenfeldtheorien scheint zunächst eine weitere Symmetrie, die Ladungskonjugation C , aufzutreten. Eine genaue Analyse zeigt jedoch, daß C und PT äquivalent sind. (Dies ist die Aussage des sogenannten CPT- Theorems.) Daher braucht man auch in der Dirac- Theorie nur die drei diskreten Symmetrien P, T und PT zu untersuchen. Es zeigt sich nun, daß die Annahme von Forminvarianz der Dirac- Gleichung unter jeweils einer dieser Transformationen zu einer jeweils spezifischen Einschränkung der möglichen Lösungen führt. Diese Überlegungen werden uns dazu führen, für eine vorgegebene radial- symmetrische Dirac- Gleichung mit Symmetriebrechung sofort den allgemeinen Lösungsansatz angeben zu können.

II.1.1 DIE LORENTZGRUPPE UND P , T UND PT

Die Lorentz- Gruppe L ist die Symmetriegruppe der speziellen Relativitätstheorie. Will man eine relativistische Quantenmechanik konstruieren, so heißt dies also, daß man quantenmechanische Bewegungsgleichungen finden muß, die invariant sind gegenüber Transformationen aus L . Wir werden im folgenden sehen, daß diese generelle Aussage etwas modifiziert werden muß. Die Modifikation betrifft gerade die diskreten Symmetrien.

Die Lorentzgruppe ist die Menge aller Transformationen, die Raum-Zeit- Abstände, und das heißt die Minkowski- Metrik invariant lassen. (In diesem Abschnitt übernehmen wir im wesentlichen die Argumentation von Streater und Wightman (Str69).) Jede solche Transformation läßt sich durch eine reelle Matrix gemäß

$$x'_\nu = \Lambda_\nu^\mu x_\mu \quad (2.1)$$

$$x'_\nu x'^\nu = x_\nu x^\nu \rightarrow \Lambda_\mu^\nu \Lambda_\sigma^\lambda g_{\nu\lambda} = g_{\mu\sigma} \quad (2.2)$$

beschreiben. Aus Gleichung (2.2) lassen sich alle für uns wichtigen Eigenschaften der Lorentztransformationen ablesen.

1.) Die Lorentztransformationen bilden eine Gruppe. Um dies zu zeigen, überprüfen wir die vier Forderungen an Gruppen.

i) Abgeschlossenheit :

Seien Λ und $\tilde{\Lambda}$ die Matrizen für zwei Lorentztransformationen

$$\tilde{\Lambda}_\lambda^\nu \tilde{\Lambda}^{\lambda'}_\nu = g_{\lambda}^{\lambda'} \quad ; \quad \Lambda_\mu^\lambda \Lambda_\sigma^\lambda = g_{\mu\sigma} \quad (2.3)$$

so folgt

$$\begin{aligned} (\Lambda \tilde{\Lambda})_\mu^\nu (\Lambda \tilde{\Lambda})_\sigma^\nu &= \Lambda_\mu^\lambda \Lambda_\sigma^{\lambda'} \tilde{\Lambda}_\lambda^\nu \tilde{\Lambda}^{\lambda'}_\nu = \\ &= \Lambda_\mu^\lambda \Lambda_\sigma^\lambda = g_{\mu\sigma} \end{aligned} \quad (2.4)$$

d.h. das Produkt zweier Lorentztransformationen ist wieder eine Lorentztransformation.

ii) Assoziativität :

Dies folgt aus der Assoziativität der Matrixmultiplikation.

iii) Existenz der Identität :

Offensichtlich ist auch $\Lambda_\mu^\nu := g_\mu^\nu$ eine Lorentztransformation, denn es erfüllt Gleichung (2.2). Für diese Matrix gilt aber:

$$\Lambda_{\mu}^{\nu} \Lambda_{\nu}^{\sigma} = \Lambda_{\mu}^{\sigma} \quad \text{für alle } \Lambda_{\mu}^{\nu} \quad (2.5)$$

d.h. dies ist das Einselement.

iv) Existenz des Inversen :

Für jede Transformation Λ beschreibt die transponierte Matrix die inverse Transformation.

$$\Lambda^{-1}_{\mu\nu} = (\Lambda^t)_{\mu\nu} \quad (2.6)$$

$$\Lambda_{\sigma\lambda} (\Lambda^t)^{\lambda}_{\nu} = \Lambda_{\sigma\lambda} \Lambda_{\nu}^{\lambda} = \eta_{\sigma\nu} = (\Lambda^t)_{\sigma\nu} \quad (2.7)$$

Nach dem allgemeinen Klassifikationsschema wird die Lorentzgruppe als $O(1,3,r)$ bezeichnet. ($O(1,3,r)$ ist die Gruppe der reellen orthogonalen Transformationen in vier Dimensionen mit der Metrik $(+, -, -, -)$.)

2.) Aus Gleichung (2.2) folgt weiterhin, wenn wir die Determinanten beider Seiten bilden :

$$\det(\Lambda \cdot \Lambda^t) = [\det(\Lambda)]^2 = 1 \quad (2.8)$$

$$\Rightarrow \det(\Lambda) = \pm 1 \quad (2.9)$$

3.) Schließlich erhält man für $\mu=0$ und $\nu=0$ die Beziehung

$$(\Lambda_{\cdot 0}^0)^2 - \sum_{j=1,2,3} (\Lambda_{\cdot 0}^j)^2 = 1 \quad (2.10)$$

$$\Rightarrow |\Lambda_{\cdot 0}^0| = |\Lambda_{00}| \geq 1$$

(2.11)

Aus Gleichung (2.9) und (2.11) folgt nun unmittelbar, daß die Lorentzgruppe in vier Teile zerfällt. Da $\text{sgn}(\Lambda_{00})$ und $\det(\Lambda)$ stetige Funktionen der Transformationsparameter sind, hängen diese vier Teile nicht miteinander zusammen, d.h. L besitzt vier Zusammenhangskomponenten. Diese vier Komponenten bezeichnet man wie folgt

$$L_+^{\uparrow} : \det(\Lambda) = +1 \quad ; \quad \text{sgn}(\Lambda_{00}) = +1$$

(eingeschränkte Lorentzgruppe)

$$L_-^{\uparrow} : \det(\Lambda) = -1 \quad ; \quad \text{sgn}(\Lambda_{00}) = +1$$

$$L_+^{\downarrow} : \det(\Lambda) = +1 \quad ; \quad \text{sgn}(\Lambda_{00}) = -1$$

$$L_-^{\downarrow} : \det(\Lambda) = -1 \quad ; \quad \text{sgn}(\Lambda_{00}) = -1$$

(2.12)

Anstatt die ganze Lorentzgruppe zu betrachten, kann man sich auch auf die eingeschränkte Lorentzgruppe $L_+^{\uparrow}$ und die drei Transformationen

$$P: \quad \Lambda_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \in L_-^{\uparrow} \quad (2.13)$$

$$T: \quad \Lambda_T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in L_-^{\downarrow} \quad (2.14)$$

$$PT: \Lambda_{PT} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \in L_+^{\downarrow} \quad (2.15)$$

beschränken. Dies ist möglich, weil man z.B. jede Transformation aus $L_-^{\uparrow}$ darstellen kann als Produkt von P und einer Transformation aus $L_+^{\uparrow}$. Diese Zusammenhänge stellt Figur 5 dar.

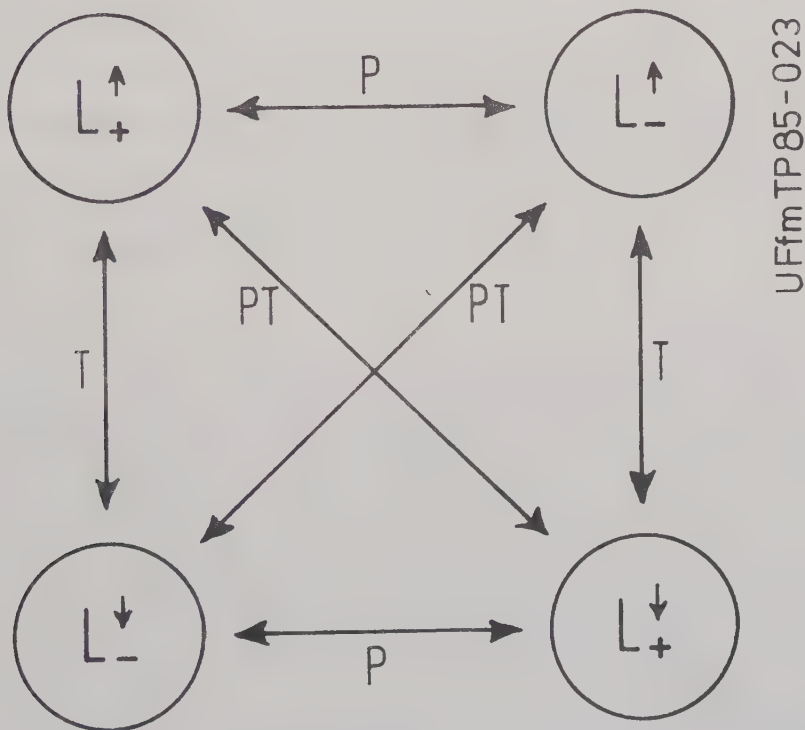


Fig.5: Die Struktur der Lorentzgruppe

Hierbei wird die Komponente $L_+^{\uparrow}$ dadurch ausgezeichnet, daß sie eine Untergruppe von L ist. $L_-^{\uparrow}, L_-^{\downarrow}$ und $L_+^{\downarrow}$ enthalten kein Einselement, erfüllen also nicht die Anforderungen an Gruppen.

Um eine relativistische Quantentheorie zu erhalten muß man in jedem Fall Invarianz unter $L_+^{\uparrow}$ fordern. Es steht einem jedoch frei, wie man bezüglich P, und T verfährt. Die verschiedenen Möglichkeiten sind in Tabelle 2; zusammengestellt. Ursprünglich war man der Meinung, die vollständige Lorentzgruppe wählen zu müssen. Der Nachweis der P- Verletzung durch Wu et al. (Wu57) im Jahr 1957 und der T- Verletzung durch Christenson et al. im Jahre 1965 (Ch65) zwang, diese Forderung aufzugeben. Bei der Konstruktion relativistischer Bewegungsgleichungen stieß man auf eine scheinbar neue Symmetrie, nämlich die Ladungskonjugation C . Es zeigte sich jedoch, daß C äquivalent ist zu PT . Dies ist die Aussage des sogenannten CPT Theorems, das in Anhang B erläutert wird. Im folgenden Abschnitt werden wir diese allgemeinen Überlegungen für den Fall der Dirac- Gleichung konkretisieren.

verletzte Symmetrien	Anzahl der reellen Funktionen im allgemeinen Lösungsansatz = Anzahl der gekoppelten Differential- gleichungen erster Ordnung
P,C und T	8
P,C oder T	4
keine	2

Tab.2: Die Wahlmöglichkeiten für die Symmetriegruppe einer relativistischen Quantenmechanik.

II.1.2 DISKRETE SYMMETRIEN UND DIE DIRAC-GLEICHUNG

Um die Invarianz der Dirac- Gleichung

$$\left(i \gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} - m \right) \psi(x_{\nu}) = 0 \quad (2.16)$$

gegenüber $L_+^{\uparrow}$ zu beweisen, muß man zeigen, daß sich zu jeder Transformation $\Lambda : x \rightarrow x'$ aus $L_+^{\uparrow}$ eine Transformation von $\psi(x) \rightarrow \psi'(x')$ angeben läßt, so daß die transformierte Dirac- Gleichung lautet

$$\left(i \gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial x'_{\mu}} - m \right) \psi'(x'_{\nu}) = 0 \quad (2.17)$$

Daß dies möglich ist, wollen wir nicht im Einzelnen vorführen, sondern verweisen auf Bj66 . Statt dessen wollen wir zeigen, daß die freie Dirac- Gleichung auch invariant ist unter P und T (und damit auch unter PT). Invariant bedeutet hierbei, daß die untransformierte und die transformierte Gleichung exakt die selben Lösungen haben. Diese Art der Invarianz bezeichnet man als 'Forminvarianz'. Um diese Forminvarianz zu erzielen, muß man z.B. für die P- Transformation einen Operator finden, der

$$\hat{\mathcal{P}}_D \left(i \gamma_0 \frac{\partial}{\partial x_0} - i \gamma_j \frac{\partial}{\partial x_j} - m \right) \hat{\mathcal{P}}_D^{-1} = \left(i \gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} - m \right) \cdot \text{const.} \quad (2.18)$$

erfüllt. Existiert ein solcher Operator, so hat die raumgespiegelte Diracgleichung genau die gleichen Lösungen wie die ungespiegelte.

$$\left(i \gamma_0 \frac{\partial}{\partial x_0} + i \gamma_j \frac{\partial}{\partial x_j} - m \right) \psi(x_0, x_j) = 0$$

$\Downarrow$ Raumspiegelung

$$(i\gamma_0 \frac{\partial}{\partial x_0} - i\gamma_j \frac{\partial}{\partial x_j} - m) \psi(x_0, -x_j) = 0$$

$$\Downarrow \hat{\mathcal{P}}_D \cdot \dots$$

$$\hat{\mathcal{P}}_D (i\gamma_0 \frac{\partial}{\partial x_0} - i\gamma_j \frac{\partial}{\partial x_j} - m) \hat{\mathcal{P}}_D^{-1} \hat{\mathcal{P}}_D \psi(x_0, -x_j) = 0 \quad (2.19)$$

$$\Downarrow$$

$$(i\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - m) \hat{\mathcal{P}}_D \psi(x_0, -x_j) = 0$$

Da die Ableitungen nur in Verbindung mit den Gamma-Matrizen γ_μ auftreten, läßt sich Gleichung (2.18) durch folgende Wahl erfüllen :

$$\hat{\mathcal{P}}_D = c \cdot \gamma_0 \quad ; \quad \hat{\mathcal{P}}_D^{-1} = \frac{1}{c} \cdot \gamma_0 \quad ; \quad c = \text{const.} \quad (2.20)$$

Die Dirac-Spinoren transformieren sich bei dieser Wahl gemäß :

$$\psi'(x) = \hat{\mathcal{P}}_D \psi(x_0, -x_j) = c \cdot \gamma_0 \psi(x_0, -x_j) \quad (2.21)$$

Die Normierung dieser neuen Lösung $\psi'(x')$ schränkt die Werte der Konstante in (2.20) auf solche vom Betrag Eins ein. Daher läßt sich $\hat{\mathcal{P}}_D$ in der Form

$$\hat{\mathcal{P}}_D = e^{i\varphi} \gamma_0 \quad (2.22)$$

schreiben. Analog muß für den Operator der Zeitumkehr

$$\hat{\mathcal{T}}_D (-i\gamma_0 \frac{\partial}{\partial x_0} + i\gamma_j \frac{\partial}{\partial x_j} - m) \hat{\mathcal{T}}_D^{-1} = (i\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - m) \cdot \text{const.} \quad (2.23)$$

gelten. In der Standarddarstellung der Gamma-Matrizen gewährleistet dies die Wahl :

$$\hat{\tau}_D \dots = \text{const. } i\gamma^1\gamma^2 [\dots]^* \quad (2.24)$$

$$\hat{\tau}_D^{-1} \dots = -\frac{1}{\text{const.}} i\gamma^4\gamma^3 [\dots]^* \quad (2.25)$$

Die Spinoren transformieren sich in diesem Fall gemäß

$$\psi'(x) = \hat{\tau}_D \psi(-x_0, x_j) = \text{const. } i\gamma^1\gamma^3 \psi^*(-x_0, x_j) \quad (2.26)$$

Die Normierung der neuen Wellenfunktionen liefert wieder eine Einschränkung für die auftretende Konstante.

$$\text{const.} = e^{i\chi} \quad (2.27)$$

$$\hat{\tau}_D \dots = e^{i\chi} i\gamma^1\gamma^3 [\dots]^* \quad (2.28)$$

Eine Dirac Wellenfunktion besteht aus vier komplexen Komponenten. Wenn nun eine der diskreten Symmetrien P, T oder PT erhalten ist, so lassen sich daraus Einschränkungen für die allgemeine Form der Dirac-Wellenfunktion gewinnen. Ist zum Beispiel die Parität eine erhaltene Symmetrie, so lassen sich die Wellenfunktionen nach solchen zu guter Parität entwickeln. Diese sind Eigenfunktionen des P - Operators, d.h. sie erfüllen :

$$\gamma_0 \psi(x_0, -x_j) = \pm \psi(x_0, x_j) \quad (2.29)$$

Wir haben uns in dieser Arbeit die Aufgabe gestellt, die radialsymmetrische Dirac- Gleichung mit einem beliebigen radialsymmetrischen Zusatzterm, der mindestens eine der diskreten Symmetrien erhält, zu lösen. Präzieser formuliert heißt dies : Sei D_{sb} der symmetrieverletzende Term der Dirac- Gleichung. So soll gelten :

$$[\hat{J}, \hat{D}_{sb}] = 0 \quad (2.30)$$

mit dem Drehimpulsoperator

$$\hat{J} = \hat{r} \times \hat{p} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

und

$$\hat{P}_D \hat{D}_{sb} \hat{P}_D^{-1} = \hat{D}_{sb}$$

oder

$$\hat{T}_D \hat{D}_{sb} \hat{T}_D^{-1} = \hat{D}_{sb}$$

oder

$$\hat{P}_D \hat{T}_D \hat{D}_{sb} (\hat{P}_D \hat{T}_D)^{-1} = \hat{D}_{sb} \quad (2.32)$$

Wir können die Lösungsfunktionen so wählen, daß sie Eigenfunktionen derjenigen der Operatoren P, T und PT sind, die mit D_{sb} vertauschen. Dies ergibt die folgenden einschränkenden Zusatzbedingungen :

falls P- Invarianz gilt :

$$Y_0 \psi(x_0, -x_j) = \pm \psi(x_0, x_j) \quad (2.33)$$

falls T- Invarianz gilt :

$$Y_1 Y_3 \psi^*(-x_0, x_j) \Rightarrow C_T \cdot \psi(x_0, x_j) \quad (2.34)$$

falls PT- Invarianz gilt :

$$\gamma_0 \gamma_1 \gamma_3 \psi^*(-x_0, -x_j) \Rightarrow c_{PT} \cdot \psi(x_0, x_j) \quad (2.35)$$

Um diese Beziehungen auszuwerten, betrachten wir die zeitunabhängigen Zustände und entwickeln diese nach Eigenfunktionen zu J^2 und J_z mit den Eigenwerten $j(j+1)$ und m . Der allgemeine Ansatz für die Wellenfunktion lautet dann :

$$\psi(x_0, x_j) = \begin{bmatrix} i G_1(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) + i G_2(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) \\ F_1(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) + F_2(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0} \quad (2.36)$$

G_1, G_2, F_1 und F_2 sind hierbei komplex.

$$\varphi_{j\mu}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} \pm m}{2\ell + 1}} Y_\ell^{\mu - \frac{1}{2}} \\ \pm \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} \mp m}{2\ell + 1}} Y_\ell^{\mu + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad ; \quad j = \ell \pm \frac{1}{2} \quad (2.37)$$

Damit die P,T oder PT- Invarianz erfüllt ist, muß die transformierte Wellenfunktion eine Lösung der Dirac- Gleichung zur selben Energie sein, d.h. sie kann sich von der ursprünglichen Lösung nur im Wert der magnetischen Quantenzahl m unterscheiden (Dies gilt allerdings nur, solange die Energien bezüglich j nicht entartet sind.). Tatsächlich geschieht dies auch für die T- und PT- Transformation. Die komplexe Konjugation dreht bei diesen das Vorzeichen der magnetischen Quantenzahl um. Berücksichtigt man diesen Umstand, so kann man die Beziehungen (2.34) und (2.35) zu folgenden Gleichungen verschärfen.

Falls T- Invarianz gilt :

$$\gamma_1 \gamma_3 \psi^*(-x_0, x_j) \Big|_{\mu \rightarrow -\mu} = \pm \psi(x_0, x_j) \quad (2.38)$$

Falls PT- Invarianz gilt :

$$\gamma_0 \gamma_1 \gamma_3 \psi^\dagger(-x_0, -x_j) \Big|_{\mu \rightarrow -\mu} = \pm \psi(x_0, x_j) \quad (2.39)$$

Die einzelnen Symmetrien liefern dann die folgenden Nebenbedingungen :

P - Invarianz :

$$\gamma_0 \psi(x_0, -x_j) = \quad (2.40)$$

$$= \begin{bmatrix} i G_1(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) (-)^{j-\frac{1}{2}} + i G_2(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) (-)^{j+\frac{1}{2}} \\ - F_1(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) (-)^{j+\frac{1}{2}} - F_2(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) (-)^{j-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} e^{-iEx_0}$$

$$= (-)^{j-\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} i G_1(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) \\ F_1(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0} + (-)^{j+\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} i G_2(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) \\ F_2(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0} =$$

$$\stackrel{!}{=} c_P \cdot \psi(x_0, \vec{x}) \quad (2.41)$$

Hierbei haben wir die folgende Eigenschaft der $\varphi_{j\mu}^{(\pm)}$ verwendet :

$$\varphi_{j\mu}^{(\pm)}(\varphi+\pi, \pi-\vartheta) = (-)^e \varphi_{j\mu}^{(\pm)}(\varphi, \vartheta) = (-)^{j+\frac{1}{2}} \varphi_{j\mu}^{(\pm)}(\Omega) \quad (2.42)$$

Aus der Symmetrie- Bedingung (2.29) können wir unmittelbar folgern, daß entweder G_1 und F_1 oder G_2 und F_2 verschwinden müssen.

$$P\text{- Invarianz} \rightarrow G_1, F_1=0 \quad \text{oder} \quad G_2, F_2=0 \quad (2.43)$$

2. T-Invarianz : In diesem Fall müssen wir den Ausdruck

$$\left. \gamma_1 \gamma_3 \psi^*(-x_0, x_j) \right|_{\mu \rightarrow -\mu} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} -i G_1^*(\nu) \varphi_{j-\mu}^{(+)*}(\Omega) - i G_2^*(\nu) \varphi_{j-\mu}^{(-)*}(\Omega) \\ F_1^*(\nu) \varphi_{j-\mu}^{(-)*}(\Omega) + F_2^*(\nu) \varphi_{j-\mu}^{(+)*}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0} \quad (2.44)$$

berechnen. Hierbei benutzen wir die Beziehung

$$Y_e^{\mu*}(\Omega) = (-)^{\mu} Y_e^{\mu}(\Omega) \quad (2.45)$$

und erhalten

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \varphi_{j-\mu}^{(\pm)*}(\Omega) =$$

$$= \begin{bmatrix} \pm \sqrt{\frac{\ell+\frac{1}{2}\pm\mu}{2\ell+1}} Y_e^{\mu-\frac{1}{2}}(\Omega) (-)^{\mu-\frac{1}{2}} \\ - \sqrt{\frac{\ell+\frac{1}{2}\mp\mu}{2\ell+1}} Y_e^{\mu+\frac{1}{2}}(\Omega) (-)^{\mu+\frac{1}{2}} \end{bmatrix} = \pm \varphi_{j\mu}^{(\pm)}(\Omega) \cdot (-)^{\mu-\frac{1}{2}}$$

$$\gamma_1 \gamma_3 \psi^*(-x_0, x_i) \Big|_{\mu \rightarrow -\mu} = \quad (2.46)$$

$$= \begin{bmatrix} -i G_1^*(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) + i G_2^*(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) \\ -F_1^*(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) + F_2^*(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0} \cdot (-)^{\mu} \quad (2.47)$$

Die Symmetrie- Bedingung (2.38) liefert in diesem Fall die Einschränkung :

T- Invarianz :

Entweder G_1, F_1 reell und G_2, F_2 imaginär

oder G_2, F_2 reell und G_1, F_1 imaginär (2.47)

Gelten sowohl P- als auch T- Invarianz , so folgt aus (2.43) und (2.47) der allgemeine Lösungsansatz :

$$\psi(x_0, x_i) = \begin{bmatrix} i g(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) \\ f(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0} \quad ; \quad g(r), f(r) \text{ reell} \quad (2.48)$$

den man in dieser Form in den Lehrbüchern (BjD64, Ro61) findet.

3. TP- Invarianz bzw. C- Invarianz

Wir benutzen die oben abgeleiteten Ergebnisse (2.41) und (2.46) und erhalten

$$\gamma_0 \gamma_1 \gamma_3 \psi^*(-x_0, -x_i) \Big|_{\mu \rightarrow -\mu} = \quad (2.49)$$

$$= (-)^{j-\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} -i G_1^*(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) - i G_2^*(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) \\ -F_1^*(r) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\Omega) - F_2^*(r) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-iEx_0}$$

Einsetzen in Gleichung (2.39) liefert in diesem Fall das Ergebnis :

PT-Invarianz :

Entweder G_1, F_1, G_2, F_2 alle reell

oder G_2, F_2, G_1, F_1 alle imaginär (2.50)

Man kann aus den Gleichungen (2.43), (2.47) und (2.50) ablesen, daß jede der diskreten Symmetrien die Anzahl der Freiheitsgrade halbiert. Sind alle drei Symmetrien verletzt, so hat die Lösung acht Freiheitsgrade, sind nur zwei Symmetrien verletzt, so treten vier Freiheitsgrade auf und sind alle Symmetrien erhalten, so hat man es mit nur zwei Radialgleichungen zu tun. (Auf Grund des CPT- Theorems ist es ausgeschlossen, daß nur eine Symmetrie verletzt wird.)

Als Beispiele und mit Hinblick auf spätere Anwendungen wollen wir zwei solche symmetriebrechenden Terme untersuchen.

a) Als erstes betrachten wir :

$$\mathcal{D}_{S8} = \rho(|\vec{r}|=r) \cdot \gamma_5 \quad (2.51)$$

Dieser Term erfüllt offensichtlich die Beziehung (2.30) :

$$\begin{aligned} [\hat{J}, \rho(r) \gamma_5]_- &= \gamma_5 \vec{r} \times \left[\frac{\vec{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r) \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \rho(r) \left\{ \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (2.52)$$

Durch explizites Ausrechnen stellen wir fest, welche Symmetrien verletzt sind :

$$\hat{P}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{P}_D^{-1} = \gamma_0 \cdot f(1-\tau) \gamma_5 \gamma_0 = -f(\tau) \gamma_5 = -\mathcal{D}_{SB}$$

P wird verletzt.

(2.53)

$$\hat{T}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{T}_D^{-1} = i \gamma^4 \gamma^3 \left[f(\tau) \gamma_5 (-i) \gamma^4 \gamma^3 \right]_{x_0 \rightarrow -x_0}^* = f(\tau) \gamma_5 = \mathcal{D}_{SB}$$

$$i \gamma^4 \gamma^3 \left[\gamma_5 (-i) \gamma^4 \gamma^3 \right]^* = -\gamma^4 \gamma^3 \gamma_5 \gamma^4 \gamma^3 = (\gamma^4)^2 (\gamma^3)^2 \gamma_5 = \gamma_5$$

T wird erhalten.

(2.54)

$$\hat{P}_D \hat{T}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{T}_D^{-1} \hat{P}_D^{-1} = \hat{P}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{P}_D^{-1} = -\mathcal{D}_{SB}$$

PT (=C) wird verletzt.

(2.55)

Alle Lösungen müssen also von der Form (2.47) sein.

$$\psi(x_0, x_j) = \begin{bmatrix} i g_1(\tau) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\omega) & - g_2(\tau) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\omega) \\ f_1(\tau) \varphi_{j\mu}^{(-)}(\omega) & - i f_2(\tau) \varphi_{j\mu}^{(+)}(\omega) \end{bmatrix} e^{-i \epsilon x_0} \quad (2.56)$$

g_1, g_2, f_1, f_2 reell

In diesem Fall sind also P und C verletzt. Der Einfachheit halber wird diese Situation als P- Verletzung bezeichnet.

b) Der zweite Term, dessen Auswirkungen wir analysieren wollen, ist

$$D_{SB} = \gamma_0 \sum_r \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r) \quad ; \quad r = |\vec{r}|$$

(2.57)

$$\sum_r = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \end{pmatrix}$$

$$\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}}{r} = -\sigma_1 \sin\varphi + \sigma_2 \cos\varphi = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}$$

Auch dieser Term erfüllt die Gleichung (2.31) :

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \gamma_0 \sum_r \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r)]_- &= [\hat{J}_i, \gamma_0 \vec{\Sigma} \cdot \vec{r} f(r)]_- = \\ &= \gamma_0 \left[\epsilon_{ijk} r_j \vec{\Sigma} \cdot (-i\partial_k \vec{r}) f(r) + \right. \\ &\quad \left. + \vec{\Sigma} \cdot \vec{r} \epsilon_{ijk} \left(-i \frac{r_k}{r} \frac{\partial}{\partial r} f(r) \right) \right] \\ &+ f(r) \gamma_0 \frac{1}{2} [\Sigma_i, \Sigma_j r_j]_- \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$= -i \gamma_0 \epsilon_{ijk} r_j \Sigma_k f(r) + i f(r) \gamma_0 \epsilon_{ijk} \Sigma_k r_j = 0$$

Wobei wir

$$f(r) := \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r)$$

und die Kommutator- Beziehung

$$[\Sigma_i, \Sigma_j]_- = 2i \epsilon_{ijk} \Sigma_k \quad (2.59)$$

verwendet haben.

Wir wenden nun wieder die einzelnen Operationen an und erhalten:

$$\hat{\mathcal{P}}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{\mathcal{P}}_D^{-1} = \gamma_0 \cdot \gamma_0 \left(\begin{array}{cccc} 0 & -ie^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ ie^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -ie^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & ie^{i\varphi} & 0 \end{array} \right) \left| \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r) \cdot \gamma_0 = \right. \\ \left. \varphi \rightarrow \varphi + \pi \right. \\ = -\gamma_0 \sum_r \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r) = -\mathcal{D}_{SB}$$

P ist verletzt.

(2.60)

$$\hat{\mathcal{T}}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{\mathcal{T}}_D^{-1} = i\gamma^1 \gamma^3 \left[\gamma_0 \sum_r \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r) (-i)\gamma^1 \gamma^3 \right]^* = \\ = -\gamma_0 \left(\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cccc} 0 & ie^{i\varphi} & 0 & 0 \\ -ie^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ie^{i\varphi} \\ 0 & 0 & -ie^{i\varphi} & 0 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{array} \right) \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r) = \\ = -\gamma_0 \left(\begin{array}{cccc} 0 & -ie^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ ie^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -ie^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & ie^{i\varphi} & 0 \end{array} \right) \frac{\partial}{\partial r} V_{cb}(r) = -\mathcal{D}_{SB}$$

T ist verletzt.

(2.61)

$$\hat{\mathcal{P}}_D \hat{\mathcal{T}}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{\mathcal{T}}_D^{-1} \hat{\mathcal{P}}_D^{-1} = -\hat{\mathcal{P}}_D \mathcal{D}_{SB} \hat{\mathcal{P}}_D^{-1} = \mathcal{D}_{SB}$$

PT (=C) ist erhalten.

(2.62)

Der allgemeine Lösungsansatz lautet also in diesem Fall (2.44)

$$\psi(x_0, x_i) = \begin{bmatrix} i g_1(r) \varphi_{jm}^{(+)}(\Omega) + i g_2(r) \varphi_{jm}^{(-)}(\Omega) \\ f_1(r) \varphi_{jm}^{(-)}(\Omega) + f_2(r) \varphi_{jm}^{(+)}(\Omega) \end{bmatrix} e^{-i E x_0} \quad (2.63)$$

g_1, g_2, f_1, f_2 reell

Der Term (2.57) verletzt also sowohl P als auch T=CP. Der Kürze halber werden wir dies als CP- Verletzung bezeichnen.

Abschließend wollen wir den Einfluß der diskreten Symmetrien auf die allgemeine Form der Lösung zusammenfassen :

Erhaltene Symmetrien	Anzahl der reellen Funktionen
keine	8
P, T oder C	4
P, T und C	2

Tab.3: Einfluß der diskreten Symmetrien auf die Anzahl der gekoppelten Radialgleichungen.

Die Anzahl der reellen Funktionen ist dann gleich der Anzahl der gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung, die zu lösen sind.

II.2 DIE PARITÄTSVERLETZENDE DIRAC-GLEICHUNG

II.2.1 HERLEITUNG DES ZUSATZTERMS

Das GSW- Modell beschreibt die Kopplung der Z- Bosonen an die Quarks und Leptonen. In diesem Abschnitt wollen wir diskutieren, wie man hieraus die paritätsverletzende Elektron- Kern- Wechselwirkung deduziert. Die beiden relevanten Teile der Lagrangedichte sind die folgenden.

e-Z- Kopplung :

$$\mathcal{L}_{eZ} = - \frac{g}{4 \cos \vartheta_W} \bar{e}(x) \gamma_\mu (C_V + \gamma_5) e(x) Z^\mu(x) \quad (2.64)$$

$$C_V = 1 - 4 \sin^2 \vartheta_W \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Quark- Z- Kopplung :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{qZ} = \frac{g}{4 \cos \vartheta_W} \{ & \bar{u}(x) \gamma_\mu (C_V^I + \gamma_5) u(x) + \\ & + \bar{c}(x) \gamma_\mu (C_V^I + \gamma_5) c(x) + \dots - \bar{d}'(x) \gamma_\mu (C_V^{II} + \gamma_5) d'(x) - \\ & - \bar{s}'(x) \gamma_\mu (C_V^{II} + \gamma_5) s'(x) - \dots \} Z^\mu(x) \end{aligned} \quad (2.65)$$

$$C_V^I = 1 - \frac{8}{3} \sin^2 \vartheta_W \quad C_V^{II} = 1 - \frac{4}{3} \sin^2 \vartheta_W$$

Hierbei gilt :

$$g^2 = \frac{8 M_W^2 G_F}{\sqrt{2}} = \frac{8 M_Z^2 G_F}{\sqrt{2}} \cos^2 \vartheta_W \quad (2.66)$$

Die Wechselwirkung eines Elektrons mit einem Kern durch neutrale Ströme wird daher beschrieben durch den 2.Ordnungs- Term.

$$\begin{aligned}
 H_{eN}^{(2)} = & \sum_{i=1}^{2Z+N} \sum_{j=1}^{2N+Z} \int d^4x' \frac{g}{4 \cos \vartheta_W} \cdot \\
 & \cdot \left\{ \bar{u}_i(x') \gamma_\mu (c_V' + \gamma_5) u_i(x') - \bar{d}_j(x') \gamma_\mu (c_V'' + \gamma_5) d_j(x') \right\} \cdot \\
 & \cdot \mathbb{D}_Z^{\mu\nu}(x'-x) \cdot \frac{g}{4 \cos \vartheta_W} \bar{e}(x) \gamma_\nu (c_V + \gamma_5) e(x) \quad (2.67)
 \end{aligned}$$

Beim Übergang von (2.64) und (2.65) zu (2.67) haben wir angenommen, daß nur die sogenannten Constituent- Quarks in den Nukleonen vorhanden sind. Auf die Bedeutung der virtuell vorhandenen Quark-Antiquark- Paare gehen wir weiter unten ein. Mit

$$\begin{aligned}
 d'(x) &= d(x) \cdot \cos \vartheta_c + s(x) \cdot \sin \vartheta_c \rightarrow d(x) \cos \vartheta_c \\
 s'(x) &= s(x) \cdot \cos \vartheta_c - d(x) \cdot \sin \vartheta_c \rightarrow -d(x) \sin \vartheta_c \quad (2.68)
 \end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned}
 & - \bar{d}'(x) \gamma_\mu (c_V'' + \gamma_5) d'(x) - \bar{s}'(x) \gamma_\mu (c_V'' + \gamma_5) s'(x) \rightarrow \\
 & \rightarrow - \bar{d}(x) \gamma_\mu (c_V'' + \gamma_5) d(x) \quad (2.69)
 \end{aligned}$$

Wir setzen

$$D_Z^{\mu\nu}(x'-x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{i p_\mu (x'-x)^\mu} \frac{g^{\mu\nu}}{p^2 - M_Z^2 + i\epsilon} \quad (2.70)$$

ein und beachten, daß die Integration über x'_μ in (2.67) eine Delta-Funktion für die Impulse liefert, die die Integration über p_μ auf einen Bereich mit $p^2 \ll M_Z^2$ begrenzt. Dies erlaubt es, für den Z-Propagator

$$D_Z^{\mu\nu}(x'-x) \hat{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{i p_\mu (x'-x)^\mu} \frac{g^{\mu\nu}}{p^2 - M_Z^2 + i\epsilon} \Theta(\kappa^2 - p^2) \approx$$

$$\kappa^2 \ll M_Z^2$$

$$\approx \frac{g^{\mu\nu}}{-M_Z^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{i p_\mu (x'-x)^\mu} \Theta(\kappa^2 - p^2) \hat{=}$$

$$\hat{=} \frac{g^{\mu\nu}}{-M_Z^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{i p_\mu (x'-x)^\mu} = \frac{g^{\mu\nu}}{-M_Z^2} \delta^4(x'-x) \quad (2.71)$$

zu ersetzen. Hierdurch vereinfacht sich (2.67) zu

$$H_{\text{eff}}(x) = \sum_{i=1}^{2Z+N} \sum_{j=1}^{2N+Z} \frac{-g^2}{16 \cos^2 \vartheta_w M_Z^2} \left\{ \bar{u}_i(x) \gamma_\mu (c'_V + \gamma_5) u_i(x) - \right. \\ \left. - \bar{d}_j(x) \gamma_\mu (c''_V + \gamma_5) d_j(x) \right\} \bar{e}(x) \gamma^\mu (c_V + \gamma_5) e(x) =$$

$$= - \frac{G_F}{2\sqrt{2}} \left\{ \sum_{i=1}^{2Z+N} j_{u_i Z}^M(x) + \sum_{j=1}^{2N+Z} j_{d_j Z}^M(x) \right\} \cdot \bar{e}(x) \gamma_\mu (C_V + \gamma_5) e(x)$$

(2.72)

Im letzten Schritt haben wir die Quarkströme

$$\begin{aligned} j_{u_i Z}^M(x) &= \bar{u}_i(x) \gamma_\mu (C_V' + \gamma_5) u_i(x) \\ j_{d_j Z}^M(x) &= - \bar{d}_j(x) \gamma_\mu (C_V'' + \gamma_5) d_j(x) \end{aligned} \quad (2.73)$$

eingeführt. Wir wollen diese Quarkströme nun in die "neutralen" Nukleonenströme

$$\begin{aligned} J_{p_i Z}^M(x) &= \bar{p}_i(x) \gamma^\mu (a_p + b_p \gamma_5) p_i(x) \quad , i=1,2,\dots, \\ J_{n_j Z}^M(x) &= \bar{n}_j(x) \gamma^\mu (a_n + b_n \gamma_5) n_j(x) \quad , j=1,2,\dots, N \end{aligned} \quad (2.74)$$

umrechnen. Hierzu setzen wir an :

$$\begin{aligned} J_{p Z}^M(x) &= 2 \left. j_{u Z}^M \right|_{u(x) \rightarrow p(x)} + \left. j_{d Z}^M \right|_{d(x) \rightarrow p(x)} = \\ &= \bar{p}(x) \gamma^\mu (2C_V' - C_V'' + \gamma_5) p(x) = \bar{p}(x) \gamma^\mu (C_V + \gamma_5) p(x) \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$J_{nZ}^M(x) = 2 j_{dZ}^M \quad d(x) \rightarrow n(x) + j_{uZ}^M \quad u(x) \rightarrow n(x) =$$

$$= \bar{n}(x) \gamma^M (C_V' - 2C_V'' - \gamma_5) n(x) = -\bar{n}(x) \gamma^M (1 + \gamma_5) n(x)$$

$$\left[\sum_{i=1}^{2Z+N} j_{u_i Z}^M + \sum_{j=1}^{2N+Z} j_{d_j Z}^M \right] \begin{matrix} u(x) \rightarrow p(x) \\ d(x) \rightarrow p(x) \end{matrix} = \sum_{i=1}^Z J_{p_i Z}^M(x) + \sum_{j=1}^N J_{n_j Z}^M(x)$$

(2.76)

Obwohl diese Ersetzung auf den ersten Blick recht überzeugend wirkt, ist Vorsicht geboten. Für die geladenen Ströme würde die gleiche Argumentation auf

$$J_w^M(x) = \bar{p}(x) \gamma^M (1 + \gamma_5) n(x) \quad (2.77)$$

führen. Aus dem Experiment deduziert man jedoch die Ströme

$$J_w^M(x) = \bar{p}(x) \gamma^M (1 + 1.25 \cdot \gamma_5) n(x) \quad (2.78)$$

Diese mit dem Stichwort PCAC (partially conserved axialvector current) bezeichnete Tatsache kann man recht gut verstehen, wenn man die exakte innere Quark-Struktur der Nukleonen berücksichtigt. Tatsächlich läßt sich der Faktor 1.25 z.B. aus Bag-Modellen relativ gut herleiten (Th82). Wir werden sehen, daß für unser Problem nur der

Vektoranteil wichtig ist. Wie der Vergleich von (2.77) und (2.78) zeigt, ist dieser wirklich einfach die Summe der Quark- Ströme, so daß die Näherung (2.75) und (2.76) gut zu sein scheint. (Diese Tatsache belegt man mit dem Kürzel CVC = conserved vector current). Gleichung (2.72) laßt sich nun schreiben als

$$H_{em}(x) = - \frac{G}{2\sqrt{2}} \left\{ \sum_{i=1}^Z \bar{p}_i(x) \gamma^\mu (C_V + g_{Ap} \gamma_5) p_i(x) - \sum_{j=1}^N \bar{n}_j(x) \gamma^\mu (1 + g_{An} \gamma_5) n_j(x) \right\} \bar{e}(x) \gamma_\mu (C_V + g_S) e(x) \quad (2.79)$$

(g_{Ap} und g_{An} stehen hierbei für (unbekannte) Renormierungsfaktoren.)

Für die Nukleonen ist eine nicht- relativistische Näherung sinnvoll. In diesem Sinne setzen wir die unteren, kleinen Komponenten von $p(x)$ und $n(x)$ gleich Null.

$$p(x) = \begin{pmatrix} \phi_p(x) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad n(x) = \begin{pmatrix} \phi_n(x) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.80)$$

Dann gilt :

$$\bar{p}(x) \gamma_0 p(x) \rightarrow \phi_p^\dagger(x) \phi_p(x) = \rho_p(x) \quad (2.81a)$$

$$\bar{p}(x) \gamma_0 \gamma_5 p(x) \rightarrow 0 \quad (2.81b)$$

$$\bar{p}(x) \vec{\gamma} p(x) \rightarrow 0 \quad (2.81c)$$

$$\bar{p}(x) \vec{\gamma} \gamma_5 p(x) \rightarrow \phi_p^\dagger \vec{\sigma}_p \phi_p \quad (2.81d)$$

Die entsprechenden Beziehungen gelten für den Neutronenstrom. Schließlich kann man sich noch überlegen, daß der Beitrag von (2.81d) sehr viel kleiner sein muß als derjenige von (2.81a). Da der Gesamtspin des Cäsiumkernes ^{133}Cs im Grundzustand 7/2 ist, müssen

sich diese Beiträge zum überwiegenden Teil gegenseitig fortheben. Somit erhalten wir schließlich

$$H_{ew}(x) = - \frac{G_F}{2\sqrt{2}} \left\{ \sum_{i=1}^Z \rho_{p_i}(x) (1 - 4 \sin^2 \vartheta_w) - \sum_{j=1}^N \rho_{n_j}(x) \right\} e^\dagger(x) (1 - 4 \sin^2 \vartheta_w + \gamma_5) e(x)$$

Schließlich führen wir die Ladungsdichte $\rho_{el}(x)$ ein und nehmen an, daß Protonen und Neutronen im Kern gleich verteilt sind.

$$\rho_{el}(x) = \sum_{i=1}^Z \rho_{p_i}(x) \quad ; \quad \sum_{j=1}^N \rho_{n_j}(x) = \frac{N}{Z} \rho_{el}(x)$$

$$H_{ew}(x) = - \frac{G_F}{2\sqrt{2}} \left(1 - 4 \sin^2 \vartheta_w - \frac{N}{Z} \right) \rho_{el}(x) \cdot e^\dagger(x) (1 - 4 \sin^2 \vartheta_w + \gamma_5) e(x) \quad (2.82)$$

Wie wir gesehen haben, sind in die Herleitung von Gleichung (2.82) recht viele Annahmen und Näherungen eingegangen. Trotzdem sollte diese Gleichung ganz gut stimmen. Der Grund hierfür ist, daß die Dichte $\rho_{el}(r)$ in (2.82) nicht nur an Z_μ sondern auch an das Photon koppelt. Die entsprechenden Gleichungen unterscheiden sich ausschließlich durch den Propagator. Somit sollte jede Korrektur zu Gleichung (2.82) in der selben Weise bei der Elektron- Nukleon- Streuung auftreten. Wenn wir daher die aus dieser Wechselwirkung empirisch ermittelte Ladungsdichte benutzen, schließen wir alle diese Korrekturen ein. Dasselbe Argument gilt auch für den Beitrag der sogenannten sea- Quarks, d.h. der virtuell vorhandenen Quark- Antiquark- Paare. Deren Beitrag zur Vakuumpolarisation sollte ebenfalls zu einer Modifikation von $\rho_{el}(r)$ führen, die aber gleichfalls in der experimentellen Ladungsdichte schon enthalten ist.

In Gleichung (2.82) verletzt nur der Term, der die Kopplung eines Vektorstromes mit einem Axialvektorstrom beschreibt, die Parität. Als Paritäts- verletzende Zusatzwechselwirkung deduzieren wir somit

$$H_{ew}(x) = g(x) e^{\dagger}(x) \gamma_5 e(x) \quad (2.83)$$

$$g(x) := - \frac{G_F}{2\sqrt{2}} \left(1 - 4\sin^2\theta_w - \frac{N}{Z} \right) \rho_{el}(x) = g(|\vec{x}|) \quad (2.84)$$

Die stationäre Dirac- Gleichung mit diesem Zusatzterm lautet also schließlich :

$$\left\{ \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m + V_{ch}(r) + g(r) \gamma_5 \right\} \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.85)$$

Diese Gleichung gilt es im folgenden zu lösen.

II.2.2 LÖSUNGSANSATZ UND ASYMPTOTIK

Aus unserer Analyse in Abschnitt II.1.2 wissen wir bereits, daß der Zusatzterm (2.85) sowohl die P- als auch die C- Symmetrie verletzt. (Siehe die Gleichung (2.54) und (2.56).) Ebenso haben wir dort schon die allgemeine Gestalt der Lösung hergeleitet, nämlich den Ansatz (2.56). Dieser lautet, wenn man den Gesamt- und Bahndrehimpuls j und l durch die Kappa- Quantenzahl κ ersetzt, die $\varphi_{jm}^{\pm}$ in χ_{κ}^{μ} umbenennt und die Funktionen g_1 , g_2 , f_1 und f_2 als g_{κ}/r , $g_{-\kappa}/r$, f_{κ}/r und $f_{-\kappa}/r$ schreibt :

$$\psi(t, \vec{x}) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} i g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) - g_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) \\ f_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) - i f_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) \end{bmatrix} \quad (2.86)$$

$$j = |k| - \frac{1}{2} \quad ; \quad \ell = \begin{cases} \kappa & \text{für } \kappa > 0 \\ -(\kappa+1) & \text{für } \kappa < 0 \end{cases} \quad (2.87)$$

$$\chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) = \begin{cases} \varphi_{j,\mu}^{+}(\Omega) & \text{für } \kappa < 0 \\ -\varphi_{j,\mu}^{-}(\Omega) & \text{für } \kappa > 0 \end{cases} \quad (2.88)$$

Wir schreiben die Dirac- Gleichung um, indem wir (Ro61)

$$\alpha \cdot \hat{p} = -i \alpha_r \frac{\partial}{\partial r} + i \frac{\alpha_r}{r} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \hat{e} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \cdot \hat{e} \end{pmatrix} \quad (2.89)$$

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

und $\vec{\sigma} \cdot \hat{e} = \beta \hat{\kappa} - 1 \quad (2.91)$

einsetzen. Auf diese Weise erhalten wir

$$\left[i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix} \left\{ -\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \hat{\kappa} & 0 \\ 0 & -\hat{\kappa} \end{pmatrix} - \frac{1}{r} \right\} + \begin{pmatrix} V_{cb} + m & 0 \\ 0 & V_{cb} - m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -f(r) \\ -f(r) & 0 \end{pmatrix} \right] \psi = E \psi \quad (2.92)$$

Kombiniert man Gleichung (2.92) mit dem Lösungsansatz (2.86) und verwendet man die weitere Beziehung

$$\sigma_r \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) = - \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) \quad (2.93)$$

so erhält man die beiden folgenden gekoppelten Gleichungen :

$$\begin{aligned} & (E - V_{cb} - m) \cdot [i g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) - g_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega)] = \\ & = i \left(-\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r} \right) \cdot [-f_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) + i f_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega)] - \\ & \quad - f(r) \cdot [f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) - i f_{-\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega)] \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$\begin{aligned} & (E - V_{cb} + m) \cdot [f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) - i f_{-\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega)] = \\ & = i \left(-\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\kappa}}{r} \right) \cdot [-i g_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) + g_{-\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega)] - \\ & \quad - f(r) \cdot [i g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) - g_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega)] \end{aligned} \quad (2.95)$$

Wir multiplizieren diese Gleichungen von links einmal mit $\chi_{\kappa}^{\mu \dagger}$ und einmal mit $\chi_{-\kappa}^{\mu \dagger}$ und integrieren jeweils über Ω . Durch Ausnutzen der Orthogonalität der sphärischen Spinoren

$$\int d\Omega \chi_{\kappa}^{\mu \dagger}(\Omega) \chi_{\kappa'}^{\mu'}(\Omega) = \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{\mu \mu'} \quad (2.96)$$

erhalten wir so die vier gekoppelten Differentialgleichungen :

$$E g_{\kappa}(r) = \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{r} \right) f_{\kappa}(r) + (V_{cb}(r) + m) g_{\kappa}(r) + f(r) f_{-\kappa}(r) \quad (2.97a)$$

$$E g_{-\kappa}(r) = -\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r}\right) f_{-\kappa}(r) + (V_{cb}(r) + m) g_{-\kappa}(r) + f(r) f_{\kappa}(r) \quad (2.97b)$$

$$E f_{\kappa}(r) = -\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r}\right) g_{\kappa}(r) + (V_{cb}(r) - m) f_{\kappa}(r) + f(r) g_{-\kappa}(r) \quad (2.97c)$$

$$E f_{-\kappa}(r) = \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{r}\right) g_{-\kappa}(r) + (V_{cb}(r) - m) f_{-\kappa}(r) + f(r) g_{\kappa}(r) \quad (2.97d)$$

Dieses Gleichungssystem ist tatsächlich reell, was zeigt, daß unser Lösungsansatz richtig ist. Um Schreibarbeit zu sparen, werden wir im Folgenden die vier reellen Funktionen $g_{\kappa}, g_{-\kappa}, f_{\kappa}$ und $f_{-\kappa}$ zu einem Vektor zusammenfassen.

$$f := \begin{pmatrix} g_{\kappa}(r) \\ g_{-\kappa}(r) \\ f_{\kappa}(r) \\ f_{-\kappa}(r) \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

Mit dieser Definition nimmt Gleichung (2.97) die etwas übersichtlichere Form

$$E f(r) = \begin{pmatrix} 1 + V_{cb}(r) & 0 & \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{r}\right) & f(r) \\ 0 & 1 + V_{cb}(r) & f(r) & -\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r}\right) \\ -\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r}\right) & f(r) & V_{cb}(r) - 1 & 0 \\ f(r) & \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{r}\right) & 0 & V_{cb}(r) - 1 \end{pmatrix} f(r) \quad (2.99)$$

an. Wir rechnen in natürlichen Einheiten und haben daher $m=1$ gesetzt. Die numerische Behandlung des Differentialgleichungssystems (2.99) setzt die Kenntnis des asymptotischen Verhaltens voraus. Dieses zu bestimmen ist daher der nächste Schritt.

Wir beginnen mit der Asymptotik für $r \rightarrow 0$. Um die asymptotische Lösung zu erhalten setzen wir eine Potenzreihe für $f(r)$ an.

$$f(r) = r^s \sum_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ d_n \end{pmatrix} r^n \quad ; \quad s > 0 \quad (2.100)$$

Ebenso entwickeln wir alle r -abhängigen Größen in Gleichung (2.99) in Taylor-Reihen nach r .

$$V_{cb}(r) = V_{cb}(0) + r V'_{cb}(0) + \frac{r^2}{2} V''_{cb}(0) + O(r^3) \quad (2.101)$$

$$f(r) = f(0) + r f'(0) + O(r^2) \quad (2.102)$$

Für $\rho(r)$ verwenden wir eine experimentell gefittete Fermiverteilung, wobei wir annehmen, daß die Protonen und Neutronen gleich verteilt sind.

$$\rho(r) = - \frac{G}{2\sqrt{2}} \left((1 - 4 \sin^2 \vartheta_w) - \frac{N}{Z} \right) \cdot \rho_Z(r) \quad (2.103)$$

$$\rho_Z(r) = R \cdot \left\{ 1 + \exp\left(\eta \cdot \left(\frac{r}{c} - 1\right)\right) \right\}^{-1} \quad (2.104)$$

$$R = \frac{3}{4\pi} \frac{Z}{c^3 + \left(\frac{\pi t}{4 \ln 3}\right)^2 c} \quad ; \quad \eta = \frac{c}{t} 4 \ln 3 \quad (2.105)$$

c, t : experimentell bestimmte Parameter

Aus (2.104) folgt

$$\rho(0) = -R \cdot \left\{ 1 + \exp[-\eta] \right\}^{-1} \cdot \frac{G}{2f^2} \left\{ (1 - 4 \sin^2 \vartheta_w) - \frac{N}{Z} \right\} \quad (2.106)$$

$$\rho'(0) = -\rho(0) \cdot \frac{\eta}{c} \frac{1}{\exp(\eta) + 1} \quad (2.107)$$

Mit den Werten $c=5.7\text{fm}$ und $t=2.3\text{fm}$ (En74) für Cäsium ist

$$\left| \frac{\rho'(0)}{\rho(0)} \right| = 3.6 \cdot 10^{-5} \quad (2.108)$$

Man kann den zweiten Term in Gleichung (2.102) also getrost vernachlässigen.

Das Coulomb- Potential setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, dem Kernpotential und dem noch zu berechnenden Hartree- Potential (bei der Asymptotik vernachlässigen wir den Austauschterm)

$$V_{cb}(r) = V_{\text{kern}}(r) + V_H(r) \quad (2.109)$$

Das Kernpotential berechnen wir aus der Ladungsverteilung ρ_p gemäß :

$$V_{\text{kern}} = -4\pi e^2 \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r \rho_z(r') r'^2 dr' + \int_r^\infty \rho_z(r') r' dr' \right\} \quad (2.110)$$

Unter Verwendung der l'Hospital'schen Regel berechnen wir hieraus :

$$\begin{aligned}
 V_{\text{kern}}(0) &= -4\pi e^2 \left\{ \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\int_0^r \rho_Z(r') r'^2 dr'}{r} + \int_0^\infty \rho_Z(r') r' dr' \right\} = \\
 &= -4\pi e^2 \left\{ \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\rho_Z(r) r^2}{1} + \int_0^\infty \rho_Z(r') r'^2 dr' \right\} = \\
 &= -4\pi e^2 \int_0^\infty \rho_Z(r') r'^2 dr' \quad (2.111)
 \end{aligned}$$

und analog

$$V'_{\text{kern}}(0) = 0 \quad (2.112)$$

$$V''_{\text{kern}}(0) = \frac{2}{3} \pi e^2 \rho_Z(0) \quad (2.113)$$

$$V'''_{\text{kern}}(0) = \frac{1}{3} \pi e^2 \rho'_Z(0) \ll V''_{\text{kern}}(0) \quad (2.114)$$

Wir gehen bis zum quadratischen Term in der Taylorentwicklung. Den Hartree- Term entwickeln wir ebenfalls bis zur zweiten Ordnung, wobei wir die Werte für $V_H(0)$, $V'_H(0)$ und $V''_H(0)$ numerisch bestimmen. Diese Terme haben zwar nur eine sehr geringe Bedeutung, wir nehmen sie aber mit in dem Bemühen, das Verhalten am Ursprung möglichst exakt zu beschreiben. Dies ist deswegen so wichtig, weil die paritätsverletzende Wechselwirkung auf das Kerninnere beschränkt ist.

Mit den Definitionen

$$\begin{aligned}
 \psi_0 &= V_{\text{kern}}(0) + V_H(0) \\
 \psi_1 &= V'_H(0) \\
 \psi_2 &= \frac{1}{2} \left(V''_{\text{kern}}(0) + V''_H(0) \right)
 \end{aligned} \quad (2.115)$$

lautet die asymptotische Form von Gleichung (2.98)

$$\begin{aligned}
 &E \sum_{n=0}^{\infty} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ d_n \end{pmatrix} r^{s+n} = \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \begin{pmatrix} a_n [(1+v_0) r^{n+s} + v_1 r^{n+s+1} + v_2 r^{n+s+2}] & 0 \\ 0 & b_n [(1+v_0) r^{n+s} + v_1 r^{n+s+1} + v_2 r^{n+s+2}] \\ -a_n (n+s+\kappa) r^{n+s-1} & f(0) b_n r^{n+s} \\ f(0) a_n r^{n+s} & b_n (n+s-\kappa) r^{n+s-1} \end{pmatrix} \\
 & \hspace{25em} (2.116) \\
 & \begin{pmatrix} c_n (n+s-\kappa) r^{n+s-1} & d_n f(0) r^{n+s} \\ c_n f(0) r^{n+s} & -d_n (n+s+\kappa) r^{n+s-1} \\ c_n [(v_0-1) r^{n+s} + v_1 r^{n+s+1} + v_2 r^{n+s+2}] & 0 \\ 0 & d_n [(v_0-1) r^{n+s} + v_1 r^{n+s+1} + v_2 r^{n+s+2}] \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

In niedrigster Ordnung von r, d.h. für n=0 folgt :

$$(s-\kappa) c_0 = (s+\kappa) d_0 = (s+\kappa) a_0 = (s-\kappa) b_0 = 0 \quad (2.117)$$

und hieraus

$$S = |\kappa| \quad (2.118)$$

$$\begin{aligned} a_0, d_0 &= 0 & \text{für } \kappa > 0 \\ c_0, b_0 &= 0 & \text{für } \kappa < 0 \end{aligned} \quad (2.119)$$

Gleichung (2.119) legt offensichtlich das Verhältnis c_0/b_0 bzw. a_0/d_0 nicht fest. Hier zeigt sich ein Unterschied zur gewöhnlichen Dirac-Gleichung. Ein System aus vier linearen homogenen Differentialgleichungen 1. Ordnung hat nämlich jeweils zwei reguläre Lösungen am Ursprung und im Unendlichen, während ein System aus zwei Differentialgleichungen nur jeweils eine besitzt und ein solches liefert die gewöhnliche radialsymmetrische Dirac-Gleichung. Wir müssen daher innen und außen jeweils zwei Testfunktionen wählen aus denen wir nachher in noch zu besprechender Weise die Lösungsfunktion konstruieren. Zu Beginn unserer Rechnung benutzen wir z.B. für die innere Asymptotik der ersten Testfunktion

$$\begin{aligned} c_0 &= \begin{cases} \text{const.} & \text{für } \kappa > 0 \\ 0 & \text{für } \kappa < 0 \end{cases} & a_0 &= \begin{cases} 0 & \text{für } \kappa > 0 \\ \text{const.} & \text{für } \kappa < 0 \end{cases} \\ b_0 &= d_0 = 0 \end{aligned} \quad (2.120)$$

Die Größe der Konstanten in (2.120) ist willkürlich. Wir wählen

$$a_0 = (s-\kappa)^{1/2} \quad c_0 = (s+\kappa)^{1/2} \quad (2.121)$$

Entsprechen wählen wir für die zweite Testfunktion

$$a_0 = c_0 = 0 \quad ; \quad b_0 = (s+\kappa)^{1/2} \quad ; \quad d_0 = (s-\kappa)^{1/2} \quad (2.122)$$

Aus Gleichung (2.116) lesen wir nun die Rekursionsbeziehungen

$$(s+n+\kappa) a_n = -(E+1-\nu_0) c_{n-1} + \nu_1 c_{n-2} + \nu_2 c_{n-3} + f(0) b_{n-1}$$

$$(s+n-\kappa) b_n = (E+1-\nu_0) d_{n-1} + \nu_1 d_{n-2} + \nu_2 d_{n-3} - f(0) a_{n-1}$$

$$(s+n-\kappa) c_n = (E-1-\nu_0) a_{n-1} + \nu_1 a_{n-2} + \nu_2 a_{n-3} - f(0) d_{n-1}$$

$$(s+n+\kappa) d_n = -(E-1-\nu_0) b_{n-1} + \nu_1 b_{n-2} + \nu_2 b_{n-3} + f(0) c_{n-1} \quad (2.123)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad ; \quad a_{-1} = b_{-1} = c_{-1} = d_{-1} = a_{-2} = b_{-2} = c_{-2} = d_{-2} = 0$$

ab. Wir gehen bis zur dritten Ordnung in r , d.h. unsere asymptotischen Wellenfunktionen sind :

$$f(r) = r^{|\kappa|} \sum_{n=0}^3 \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ d_n \end{pmatrix} r^n \quad (2.124)$$

Die Asymptotik für $r \rightarrow \infty$ ist einfach, da in diesem Fall unser Gleichungssystem in zwei gewöhnliche Dirac-Gleichungen zerfällt, deren asymptotischen Lösungen bekannt sind (Ro61).

$$\begin{aligned} g_{\kappa} &= a \sqrt{1+E} e^{-\sqrt{1-E^2} r} \\ f_{\kappa} &= a \sqrt{1-E} e^{-\sqrt{1-E^2} r} \\ g_{-\kappa} &= b \sqrt{1+E} e^{-\sqrt{1-E^2} r} \\ f_{-\kappa} &= b \sqrt{1-E} e^{-\sqrt{1-E^2} r} \end{aligned} \quad (2.125)$$

Wieder ist die Asymptotik nicht eindeutig, das Verhältnis a/b ist frei, eben weil es zwei reguläre asymptotische Lösungen gibt. Auch in diesem Fall müssen wir wieder zwei Testfunktionen wählen.

1. Testfunktion :

$$f(r) = \begin{pmatrix} \sqrt{1+E} \\ 0 \\ \sqrt{1-E} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\sqrt{1-E^2} r} \quad (2.126)$$

2. Testfunktion :

$$f(r) = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1+E} \\ 0 \\ \sqrt{1-E} \end{pmatrix} e^{-\sqrt{1-E^2} r} \quad (2.127)$$

Damit ist die Behandlung der Asymptotik abgeschlossen. Im nächsten Abschnitt werden wir die Berechnung des Hartree- Fock- Potentials erläutern. Die eigentliche numerische Behandlung des zu lösenden Differentialgleichungssystems wird dann im Kapitel III beschrieben.

II.3. DIE ELEKTRON- ELEKTRON- WECHSELWIRKUNG

Das Hauptproblem der Berechnung der paritätsverletzenden Effekte in Cäsium ist die Berechnung der Elektron- Elektron- Wechselwirkung. Dies geschieht üblicherweise mittels der Einführung des nicht- lokalen Hartree- Fock- Potentials. Wir folgen diesem Weg, erweitern das übliche Hartree- Fock- Potential jedoch um einen Anteil, der die paritätsverletzende Elektron- Elektron- Wechselwirkung durch neutrale Ströme beschreibt. Außerdem werden wir in Abschnitt 2.5 diskutieren, wie man über die Hartree- Fock- Näherung hinaus gehen kann.

II.3.1 DAS ELEKTROMAGNETISCHE HF- POTENTIAL

Wir beginnen unsere Überlegungen damit, das Matrixelement der Coulomb- Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen zu berechnen. Die beiden Elektronen mögen sich vor der Wechselwirkung in Drehimpuls- Eigenzuständen mit den Quantenzahlen (j_v, μ_v) und (j_s, μ_s) befinden. Durch die Wechselwirkung können sie in andere Zustände übergehen. Wir bezeichnen die Endzustände mit (j_r, μ_r) und (j_b, μ_b) . Weiterhin schreiben wir im folgenden grundsätzlich "v" für " j_v ", "s" für " j_s " usw. sofern hierdurch keine Verwechslung möglich wird. Außerdem verwenden wir die Abkürzung

$$[j] := 2j + 1, \quad [j, j'] := [j] \cdot [j'] \quad (2.128)$$

Das gesuchte Coulomb- Matricelement entspricht dem Graphen

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} r \mu_r \\ \uparrow \\ \vdots \\ \uparrow \\ v \mu_v \end{array} & \begin{array}{c} b \mu_b \\ \uparrow \\ \vdots \\ \uparrow \\ s \mu_s \end{array} & \\
 & \text{---} &
 \end{array} \quad \hat{=} \quad \langle r b | g | v s \rangle \quad (2.129)$$

Die gepunktete Linie steht hier für den Coulomb- Propagator, der im Ortsraum

$$\mathcal{D}_{cb}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{[L]} \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} Y_{LM}^*(\vartheta', \varphi') Y_{LM}(\vartheta, \varphi) \quad (2.130)$$

lautet (Ja75). Hierbei sind

$$\vec{r} \rightarrow (r, \vartheta, \varphi) \quad \vec{r}' \rightarrow (r', \vartheta', \varphi')$$

die sphärischen Koordinaten der beiden Elektronen, und $r_{<}$ und $r_{>}$ definiert durch

$$r_{<} = \min(r, r') \quad r_{>} = \max(r, r') \quad (2.131)$$

Das Matricelement (2.129) lautet mit (2.130) und dem Ansatz (2.86) also :

$$\begin{aligned}
 \langle r b | g | v s \rangle &= e^2 \int d^3 \vec{r} \int d^3 \vec{r}' \psi_r^+(\vec{r}) \psi_v(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_b^+(\vec{r}') \psi_s(\vec{r}') \\
 &= e^2 \sum_{L,M} \frac{4\pi}{[L]} \int dr d\Omega dr' d\Omega' \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left\{ -i g_{\kappa_r}(r) \chi_{\kappa_r}^{\mu_r \dagger}(\Omega) - g_{-\kappa_r}(r) \chi_{-\kappa_r}^{\mu_r \dagger}(\Omega) \right\} \cdot Y_{LM}(\Omega) \cdot \\
& \cdot \left\{ i g_{\kappa_v}(r) \chi_{\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) - g_{-\kappa_v}(r) \chi_{-\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) \right\} \cdot \\
& \cdot \left\{ -i g_{\kappa_b}(r') \chi_{\kappa_b}^{\mu_b \dagger}(\Omega') - g_{-\kappa_b}(r') \chi_{-\kappa_b}^{\mu_b \dagger}(\Omega') \right\} \cdot Y_{LM}^*(\Omega') \cdot \\
& \cdot \left\{ i g_{\kappa_s}(r') \chi_{\kappa_s}^{\mu_s}(\Omega') - g_{-\kappa_s}(r') \chi_{-\kappa_s}^{\mu_s}(\Omega') \right\}
\end{aligned}
\tag{2.132}$$

Dieser Ausdruck stellt eine näherungsweise Beschreibung der Elektron-Elektron- Wechselwirkung dar. Sowohl die Wechselwirkung durch magnetische Felder, als auch die Effekte der Retardierung werden vernachlässigt. Wir schreiben dies um, indem wir die Radialfunktionen durch ϕ_r, ϕ_v, ϕ_b und ϕ_s ersetzen (siehe Gleichung (2.98)). Weiterhin definieren wir

$$\langle \kappa \mu | Y_{LM} | \kappa' \mu' \rangle = \int d\Omega \chi_{\kappa}^{\mu \dagger}(\Omega) Y_{LM}(\Omega) \chi_{\kappa'}^{\mu'}(\Omega) \tag{2.133}$$

Damit wird aus (2.132)

$$\langle r b | g | v s \rangle = e^2 \sum_{L,M} \frac{4\pi}{[L]} \int dr \int dr' \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \cdot$$

$$\cdot \left\{ f_r^{\dagger}(\nu) \cdot f_{\nu}(\nu) \langle \kappa_r \mu_r | Y_{LM} | \kappa_{\nu} \mu_{\nu} \rangle - \right. \\ \left. - i f_r^{\dagger}(\nu) \cdot \Gamma \cdot f_{\nu}(\nu) \langle \kappa_r \mu_r | Y_{LM} | \kappa_{\nu} \mu_{\nu} \rangle \right\}.$$

$$\cdot \left\{ f_b^{\dagger}(\nu) \cdot f_s(\nu) \langle \kappa_b \mu_b | Y_{LM}^* | \kappa_s \mu_s \rangle - \right. \\ \left. - i f_b^{\dagger}(\nu) \cdot \Gamma \cdot f_s(\nu) \langle \kappa_b \mu_b | Y_{LM}^* | \kappa_s \mu_s \rangle \right\}$$

(2.134)

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

(2.135)

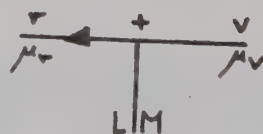
Die Berechnung der Größen

$$\langle \kappa_{\mu} | Y_{LM} | \kappa' \mu' \rangle$$

wird im Anhang C besprochen. Das Resultat lautet :

$$\langle \kappa_r \mu_r | Y_{LM} | \kappa_{\nu} \mu_{\nu} \rangle =$$

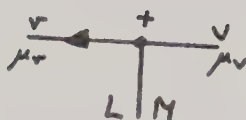
$$= C_L(\nu r) \cdot \left(\frac{[L]}{4\pi} \right)^{1/2} (-)^{r-\nu}$$



$$= \langle \kappa_r \mu_r | Y_{LM} | \kappa_{\nu} \mu_{\nu} \rangle^* = \langle \kappa_{\nu} \mu_{\nu} | Y_{LM}^* | \kappa_r \mu_r \rangle$$

$$\langle \kappa_r \mu_r | Y_{LM} | \kappa_v \mu_v \rangle =$$

$$= C_L(v \bar{v}) \cdot \left(\frac{[L]}{4\pi} \right)^{1/2} (-)^{r-v}$$



$$= \langle -\kappa_v \mu_v | Y_{LM}^* | \kappa_r \mu_r \rangle$$

$$C_L(v r) = (-)^{v+\frac{1}{2}} [r, v]^{1/2} \begin{pmatrix} v & r & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \pi(\ell_r + \ell_v + L) =$$

$$= (-)^{v-r} C_L(r v)$$

(2.136)

$$C_L(v \bar{v}) = (-)^{v+\frac{1}{2}} [r, v]^{1/2} \begin{pmatrix} v & r & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \pi(\ell_r + \ell_v + L + 1)$$

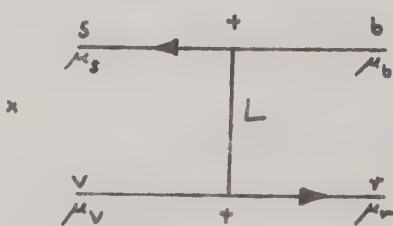
$$= C_L(\bar{v} r) = (-)^{v-r} C_L(r \bar{v})$$

$$\pi(\ell) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \ell \text{ gerade} \\ 0 & \text{falls } \ell \text{ ungerade} \end{cases}$$

(2.137)

Hierbei wurde die in Anhang D beschriebene graphische Darstellung der Drehimpulskopplungen benutzt. Wir setzen diese Ergebnisse in Gleich-

ung (2.135) ein und erhalten so für das Matrixelement der elektromagnetischen Elektron- Elektron- Wechselwirkung :

$$\langle vb|g|vs\rangle = \sum_L G_L(vv,bs) (-)^{r-v+s-b} \quad x$$


(2.138)

$$G_L(vv,bs) := R_{11}^L(vv,bs) C_L(vv) C_L(bs) - i R_{1r}^L(vv,bs) C_L(vv) C_L(b\bar{s}) -$$

$$- i R_{r1}^L(vv,bs) C_L(v\bar{v}) C_L(bs) - R_{rr}^L(vv,bs) C_L(v\bar{v}) C_L(b\bar{s})$$

(2.139)

$$R_{a,b}^L(vv,bs) := \int dr \int dr' f_r^t(r) \cdot A \cdot f_v(r) \quad f_b^t(r) \cdot B \cdot f_s(r) \cdot$$

$$\cdot \frac{e^2 r_s^L}{r_s^{L+1}} \quad A, B = 1, \Gamma$$

(2.140)

Mit der Kenntnis dieses Matrixelements können wir nun das Hartree-Fock- Potential berechnen. Der Hartree- Fock- Operator ist ein Zwei-Teilchen- Operator, der die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Teilchen (die wir mit 1 und 2 bezeichnen) beschreibt.

$$\hat{G} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

(2.141)

Er wirkt auf die Zwei- Teilchen- Zustände

$$|\{v,s\}\rangle$$

die aufgrund des Pauli- Prinzips antisymmetrisch sein müssen.

$$|\{v,s\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |v\rangle_1 |s\rangle_2 - |s\rangle_1 |v\rangle_2 \}$$

(2.142)

Ein solcher Zwei-Teilchen-Zustand entspricht einem System aus zwei Elektronen, von denen sich eines im Drehimpulszustand (j_v, μ_v) und eines im Zustand (j_s, μ_s) befindet. Ein solches System kann z.B. durch eine Wechselwirkung mit einem Photon in einen anderen Zwei-Teilchen-Zustand

$$|\{v, b\}\rangle$$

übergehen. Es kann aber auch zu einer elektromagnetischen Wechselwirkung der Elektronen untereinander kommen. In diesem Fall ist der Endzustand gleich dem Anfangszustand. Das Matrixelement hierfür ist :

$$\begin{aligned} \langle \{v, s\} | \hat{G} | \{v, s\} \rangle &= \langle v |_1 \langle s |_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | s \rangle_2 | v \rangle_1 - \\ &- \langle v |_1 \langle s |_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | v \rangle_2 | s \rangle_1 = \end{aligned} \quad (2.143)$$

$$= \langle v s | g | v s \rangle - \langle v s | g | s v \rangle$$

Wir betrachten nun einen gegebenen Zustand "v" und summieren Gleichung (2.143) über alle besetzten Zustände "s" mit Ausnahme von "v" selber.

$$\begin{aligned} \sum_{j_s, \mu_s} \langle \{v, s\} | \hat{G} | \{v, s\} \rangle &= \\ &= \sum_{\substack{j_s, \mu_s \\ s \neq v}} \left\{ \langle v s | g | v s \rangle - \langle v s | g | s v \rangle \right\} \end{aligned} \quad (2.144)$$

Gleichung (2.144) ist das Matrixelement der Wechselwirkung eines Elektrons "v" mit allen übrigen Elektronen des Atoms. Da G gerade das Potential zwischen den beiden Elektronen ist, gibt (2.144) an, wie groß der Beitrag dieser Wechselwirkung zur Energie ist. Um den Einfluß auf die Wellenfunktion Ψ_v zu erhalten, muß man diesen Ausdruck nach Ψ_v variieren, während man alle anderen Wellenfunktionen fest hält. Dann

liefert (2.144) einen Zusatzterm in der Einteilchen- Bewegungsgleichung für Ψ_v .

$$\langle v | \hat{V}_{HF} | v \rangle := \sum_{\substack{j_s, \mu_s \\ s \neq v}} \{ \langle v s | g | v s \rangle - \langle v s | g | s v \rangle \} = \quad (2.145)$$

$$= \sum_{j_s, \mu_s} \{ \langle v s | g | v s \rangle - \langle v s | g | s v \rangle \}$$

$$\hat{H} | v \rangle = E | v \rangle \longrightarrow \hat{H} | v \rangle = E | v \rangle - \hat{V}_{HF} | v \rangle \quad (2.146)$$

Dieser Übergang zur Einteilchen- Beschreibung bedeutet, daß man die Elektron- Elektron- Wechselwirkung so behandelt, als ob sich jedes Elektron im jeweils festen Potential der anderen Elektronen bewegen würde.

Mit Hilfe von (2.138) läßt sich die rechte Seite von (2.145) berechnen. Den erhaltenen Ausdruck variiert man nach Ψ_v und erhält auf diese Weise den Hartree- Fock- Zusatzterm zu Gleichung (2.85). Folgt man dann den Schritten, die wir in Abschnitt III.2.2 vorgeführt haben, diesmal für die um den Hartree- Fock- Term erweiterte Dirac- Gleichung, so erhält man schließlich die gekoppelten reellen Hartree- Fock- Gleichungen für ϕ_v . Wir werden diesen recht mühseligen Weg hier etwas abkürzen, indem wir

$$\langle v | \hat{V}_{HF} | v \rangle$$

soweit als möglich vereinfachen, und dann die Variation nach Ψ_v durch die Variation nach ϕ_v ersetzt. Graphisch wird das Hartree- Fock- Matricelement dargestellt durch :

$$\langle v | \hat{V}_{HF} | v \rangle \hat{=} \sum_{j_s, \mu_s} \left\{ \begin{array}{c} j_v | \mu_v \quad j_s | \mu_s \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \quad \uparrow \\ j_v | \mu_v \quad j_s | \mu_s \end{array} - \begin{array}{c} j_s | \mu_s \quad j_v | \mu_v \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \quad \uparrow \\ j_v | \mu_v \quad j_s | \mu_s \end{array} \right\} \quad (2.147)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (2.138) erhalten wir :

$$\langle v | \hat{V}_{HF} | v \rangle =$$

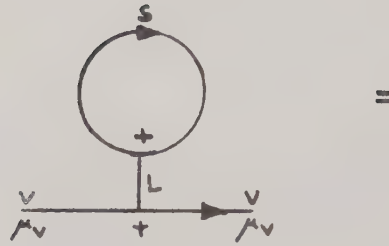
$$= \sum_{j_s, L} \left[G_L(j_v j_v, j_s j_s) \right.$$

-

$$- G_L(j_v j_s, j_s j_v) \left. \right]$$

(2.148)

Hierbei haben wir jeweils die beiden freien "s"- Linien der Drehimpulsgraphen verbunden und die Konvention benutzt, daß über nicht angegebene J_z - Quantenzahlen summiert wird. (siehe (D.6)). Dies impliziert, daß nur volle Elektronenschalen auftreten. Tatsächlich befindet sich in der äußersten Schale von Cäsium jedoch nur ein einziges Elektron. Dessen Beitrag zum Hartree- Fock- Potential werden wir also vernachlässigen. Eine solche Näherung wird als v^{Z-1} - Hartree- Fock- Rechnung bezeichnet. Die Auswertung der Drehimpulskopplungen erfolgt mittels der in Anhang D aufgeführten Regeln.



(D.15)

$$= \sum_M [s]^{1/2} \begin{array}{c} O \quad O \\ | \\ L \quad M \\ + \\ \frac{v}{\mu_v} \quad \frac{v}{\mu_v} \end{array} =$$

(D.3)

$$= \delta_{L0} [s]^{1/2} \begin{array}{c} O \quad O \\ | \\ \frac{v}{\mu_v} \quad \frac{v}{\mu_v} \end{array} =$$

(D.12)

$$= \delta_{L0} \sqrt{\frac{[s]}{[v]}} \begin{array}{c} \frac{v}{\mu_v} \quad \frac{v}{\mu_v} \end{array} =$$

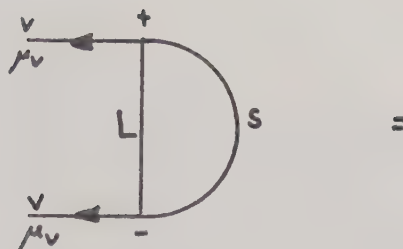
(D.9)

$$= \delta_{L0} \sqrt{\frac{[s]}{[v]}} \begin{array}{c} \frac{v}{\mu_v} \quad \frac{v}{\mu_v} \end{array} =$$

(D.3)

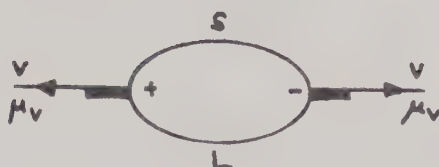
$$= \delta_{L0} \sqrt{\frac{[s]}{[v]}} \quad (2.149)$$

Für den zweiten Drehimpulsgraph erhält man



(D.5)

$$= \frac{1}{[v]}$$



(D.14)

$$= \frac{1}{[v]} \quad \begin{array}{c} \xleftarrow{v} \mu_v \quad \longleftrightarrow \quad \xrightarrow{v} \mu_v \end{array} \cdot \Delta(L, v, s)$$

(D.9)

$$= \frac{1}{[v]} \quad \begin{array}{c} \xleftarrow{v} \mu_v \quad \text{---} \quad \xrightarrow{v} \mu_v \end{array} \cdot \Delta(L, v, s)$$

(D.3)

$$= \frac{1}{[v]} \Delta(L, v, s) \tag{2.150}$$

$$\Delta(L, v, s) = \begin{cases} 1 & \text{falls } L+v \geq s \text{ und } L+s \geq v \text{ und } s+v \geq L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.151}$$

Man beachte, daß (2.150) nur dann nicht verschwindet, wenn die Drehimpulse s, v und L die Dreiecksungleichung erfüllen. (Formal wird dies durch die auftretenden 3j- Symbole sichergestellt.)

Das Matrixelement der Elektron- Elektron- Wechselwirkung lautet somit also :

$$f_v^t V_{HF} f_v = \sum_{s,L} \left[G_o(vv,ss) \delta_{Lo} \sqrt{\frac{[s]}{[v]}} - G_L(vs,sv) \frac{1}{[v]} \right] \quad (2.152)$$

In diesen Ausdruck setzen wir nun (2.139) und (2.140) ein.

$$\begin{aligned} f_v^t V_{HF} f_v = & \sum_s \sqrt{\frac{[s]}{[v]}} \left[R_{11}^o(vv,ss) C_o(vv) C_o(ss) - \right. \\ & - i R_{1\pi}^o(vv,ss) C_o(vv) C_o(s\bar{s}) - i R_{\pi 1}^o(vv,ss) C_o(v\bar{v}) C_o(ss) - \\ & \left. - R_{\pi\pi}^o(vv,ss) C_o(v\bar{v}) C_o(s\bar{s}) \right] \\ & - \sum_{L,s} \frac{1}{[v]} \left[R_{11}^L(vs,sv) C_L(sv) C_L(sv) - \right. \\ & - i R_{1\pi}^L(vs,sv) C_L(sv) C_L(s\bar{v}) - i R_{\pi 1}^L(vs,sv) C_L(s\bar{v}) C_L(sv) - \\ & \left. - R_{\pi\pi}^L(vs,sv) C_L(s\bar{v}) C_L(s\bar{v}) \right] \end{aligned} \quad (2.153)$$

Dieser Ausdruck vereinfacht sich stark, wenn man die explizite Form der $C_L(vr)$ einsetzt (siehe Gleichung (2.137)).

$$C_o(s\bar{s}) \sim \pi(\ell_s + \ell_s + 1 + 0) = \pi(1) = 0 \quad (2.154)$$

$$\begin{aligned} C_o(ss) &= (-)^{s+\frac{1}{2}} [s] \begin{pmatrix} s & s & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \pi(\ell_s + \ell_s) = \\ &= (-)^{s+\frac{1}{2}} [s] (-)^{s+\frac{1}{2}} [s]^{-\frac{1}{2}} = [s]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.155)$$

Man beachte, daß "s" halbzahlig und somit $(-)^{2s}$ gleich -1 ist.

$$\begin{aligned}
 (sv) C_L(sv) &= (-)^{s+\frac{1}{2}+s+\frac{1}{2}} [s,v] \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \pi(l_s+l_v+L) \\
 &= [s,v] \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \pi(l_s+l_v+L) \quad (2.156)
 \end{aligned}$$

$$(sv) C_L(s\bar{v}) \sim \pi(l_s+l_v+L) \cdot \pi(l_s+l_v+L+1) \sim 0 \quad (2.157)$$

$$\begin{aligned}
 (s\bar{v}) C_L(s\bar{v}) &= (-)^{s+\frac{1}{2}+s+\frac{1}{2}} [s,v] \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \pi(l_s+l_v+L+1) \\
 &= [s,v] \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (2.158)
 \end{aligned}$$

Wir setzen alle diese Gleichungen in (2.153) ein und erhalten

$$\begin{aligned}
 f_v^+ \hat{V}_{HF} f_v &= \sum_s [s] R_{11}^0(vv,ss) - \\
 &\sum_{L,s} \frac{1}{[v]} [v,s] \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \left[R_{11}^L(vs,sv) \cdot \pi(l_s+l_v+L) - \right. \\
 &\quad \left. - R_{11}^L(vs,sv) \cdot \pi(l_s+l_v+L+1) \right] \quad (2.159)
 \end{aligned}$$

Aus dieser Formel können wir die Wirkung von V_{HF} auf den Zustand mit dem Drehimpuls j_b ablesen.

$$\hat{V}_{HF} f_v(r) = e^2 \sum_s [s] \int dr' \left\{ \frac{1}{r_{>}} f_s^t(r') \cdot f_s(r') f_v(r) - \right. \\ \left. - \sum_L \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \left[f_s^t(r') \cdot f_v(r') f_s(r) \pi(l_s + l_v + L) - \right. \right. \\ \left. \left. - f_s^t(r') \cdot \Gamma f_v(r') \Gamma f_s(r) \pi(l_s + l_v + L + 1) \right] \right\} \quad (2.160)$$

Formal erhält man dieses Ergebnis durch Variation nach f_v^t . Die Hartree-Fock-Gleichungen für f_v lautet dann:

$$(\hat{H} - \hat{V}_{HF}) f_v(r) = E f_v(r) \quad (2.161)$$

mit H aus Gleichung (2.99). Eine Lösung dieser Gleichung ist nur numerisch möglich. Das benutzte Verfahren wird in Kapitel III beschrieben werden.

Es ist recht aufschlußreich, unser Hartree-Fock-Potential mit dem der gewöhnlichen zwei-komponentigen Theorie zu vergleichen. Dieses lautet (Jo79):

$$\psi_v = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} i G_v(r) \chi_{\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) \\ F_v(r) \chi_{-\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) \end{pmatrix} \quad (2.162)$$

$$f_v(r) = \begin{pmatrix} G_v(r) \\ F_v(r) \end{pmatrix} \quad (2.163)$$

$$\hat{V}_{HF} f_v(r) = e^2 \sum_s [s] \int dr' \left\{ \frac{1}{r_{>}} f_s^t(r') \cdot f_s(r') f_v(r) - \sum_L \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 f_s^t(r') \cdot f_v(r') f_s(r) \pi(\ell_s + \ell_v + L) \right\}$$

(2.164)

Der Vergleich von (2.160) mit (2.164) zeigt, daß für die vierkomponentige Theorie ein Zusatzterm auftritt, der die sonst übliche Paritätsauswahlregel verletzt. Dieser Term ist für die Komponenten mit der "richtigen" Parität wesentlich kleiner als der erste Austausch-Beitrag, für die Komponenten mit "falscher" Parität aber von gleicher Ordnung. So liefert (2.160) z.B. für die erste Komponente, die zur "richtigen" Parität gehört :

$$\begin{aligned} \text{1. Term : } f_s^t(r') \cdot f_v(r') f_s(r) \Big|_{1. \text{Komp.}} &= (g_{\kappa_s}(r') \cdot g_{\kappa_v}(r') + \\ &+ g_{-\kappa_s}(r') g_{-\kappa_v}(r') + f_{\kappa_s}(r') f_{\kappa_v}(r') + f_{-\kappa_s}(r') f_{-\kappa_v}(r')) \cdot g_{\kappa_s}(r) \\ &= (g_{\kappa_s}(r') g_{\kappa_v}(r') + f_{\kappa_s}(r') f_{\kappa_v}(r')) g_{\kappa_s}(r) + O(\varepsilon^2) \\ \text{2. Term : } f_s^t(r') \cdot \Gamma \cdot f_v(r') \Gamma f_s(r) \Big|_{1. \text{Komp.}} &= (-g_{\kappa_s}(r') g_{-\kappa_v}(r') + \\ &+ g_{-\kappa_s}(r') g_{\kappa_v}(r') + f_{\kappa_s}(r') f_{-\kappa_v}(r') - f_{-\kappa_s}(r') f_{\kappa_v}(r')) \cdot \\ &\cdot (-g_{-\kappa_s}(r)) = O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

(2.165)

Hierbei haben wir das mittlere Verhältnis der Komponenten mit "rich-

tiger" Parität zu denen mit "falscher" Parität als ε bezeichnet. Als Ergebnis unserer numerischen Rechnung finden wir, daß ε kleiner ist als 10^{-8} . Analog liefert Gleichung (2.160) für die zweite Komponente ("falsche" Parität) die Beiträge

$$\begin{aligned}
 1. \text{Term : } \left. f_s^t(r) \cdot f_v(r) \cdot f_s(r) \right|_{2. \text{Komp.}} &= (g_{\kappa_s(r)} g_{\kappa_v(r)} + \\
 &+ f_{\kappa_s(r)} f_{\kappa_v(r)} + O(\varepsilon^2)) g_{-\kappa_s(r)} \\
 2. \text{Term : } \left. f_s^t(r) \cdot \Gamma \cdot f_v(r) \cdot \Gamma f_s(r) \right|_{2. \text{Komp.}} &= (-g_{\kappa_s(r)} g_{-\kappa_v(r)} + \\
 &+ g_{-\kappa_s(r)} g_{\kappa_v(r)} + f_{\kappa_s(r)} f_{-\kappa_v(r)} - f_{-\kappa_s(r)} f_{\kappa_v(r)}) \cdot \\
 &\cdot g_{\kappa_s(r)}
 \end{aligned} \tag{2.166}$$

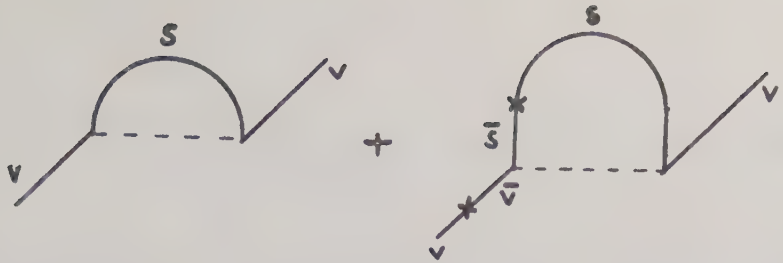
Für diese Komponente wird der Zusatzterm also wichtig.

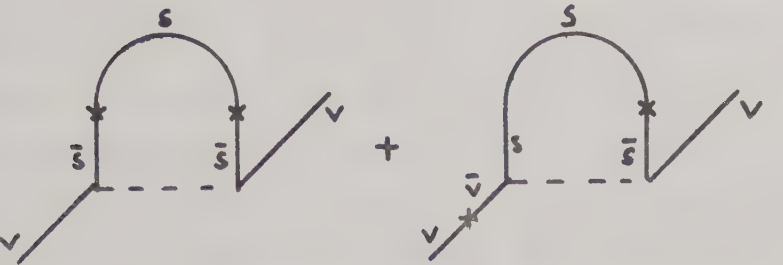
Aus diesen Überlegungen kann man unter anderem schon jetzt erkennen, daß die Komponenten mit "richtiger" Parität in der Hartree- Fock- Näherung fast exakt mit den üblichen Hartree- Fock- Wellenfunktionen übereinstimmen müssen. Korrekturen sind von der Ordnung

$$\varepsilon^2 < 10^{-16} \tag{2.167}$$

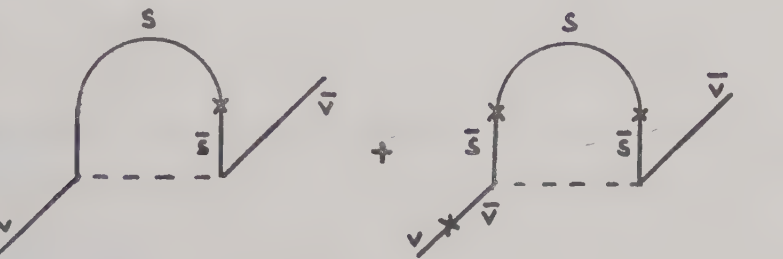
Von der selben Ordnung, also vollständig vernachlässigbar, ist die Energiekorrektur durch die neutralen Ströme.

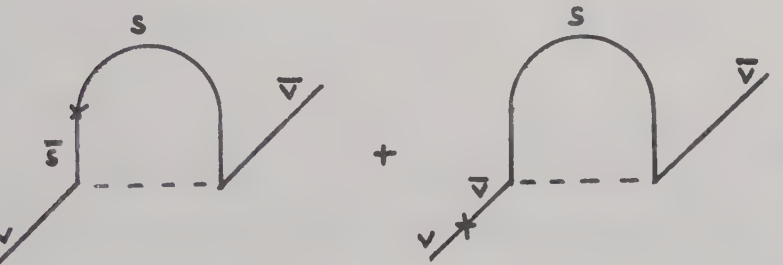
Die Bedeutung der einzelnen Beiträge in (2.165) und (2.166) läßt sich auch dadurch veranschaulichen, daß man sich überlegt, welche Graphen ihnen bei einer störungstheoretischen Behandlung der Paritätsverletzung (in niedrigster Ordnung) entsprechen. Für die 1. Komponente :

1.Term  (2.168)

2.Term  (2.169)

Für die 2.Komponente :

1.Term  (2.170)

2.Term  (2.171)

Hierbei stehen die Kreuze jeweils für eine paritätsverletzende Wechselwirkung mit dem Kern durch neutrale Ströme. Die überstrichenen Zustände s, v stehen jeweils für den hierbei beigemischten Anteil "falscher" Parität.

11.3.2 DIE E-E-WECHSELWIRKUNG DURCH NEUTRALE STRÖME

Bisher haben wir uns nur mit den Auswirkungen der paritätsverletzenden Elektron- Elektron- Wechselwirkung beschäftigt. Im Glashow- Salam- Weinberg- Modell verletzt jedoch auch die Elektron- Elektron- Wechselwirkung die Paritäts- Invarianz, denn auch die Elektronen tauschen Z_0 - Bosonen untereinander aus. Diesen Prozess wollen wir jetzt näher untersuchen. Es wird sich zeigen, daß im Rahmen unserer vierkomponentigen Beschreibung diese Zusatzwechselwirkung zum Auftreten weiterer Terme im Hartree- Fock- Potential führt.

Wir beginnen mit unseren Überlegungen wieder bei der Lagrangedichte des Glashow- Salam- Weinberg- Modells. Der für uns wichtige Anteil beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen mit den Z_0 -Bosonen. (Siehe (2.64))

$$\hat{\mathcal{L}}_{eZ}(x) = - \frac{g^2}{4 \cos^2 \vartheta_w} \hat{e}(x) \gamma_\mu (C_V + \gamma_5) \hat{e}(x) Z^\mu(x) \quad (2.172)$$

$$C_V = 1 - 4 \sin^2 \vartheta_w$$

Mit Gleichung (2.71) erhalten wir als effektive Elektron- Elektron- Wechselwirkung

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ee} &= - \frac{1}{2} \frac{g^2}{16 \cos^2 \vartheta_w} \int \left\{ \hat{e}(x) \gamma_\mu (C_V + \gamma_5) \hat{e}(x) \cdot \right. \\ &\quad \cdot D_Z^{\mu\nu}(x'-x) \left. \right\} d^4x' \cdot \hat{e}(x) \gamma_\mu (C_V + \gamma_5) \hat{e}(x) \\ &= \frac{G}{4 \sqrt{2}} \hat{e}(x) \gamma_\mu (C_V + \gamma_5) \hat{e}(x) \cdot \\ &\quad \cdot \hat{e}(x) \gamma^\mu (C_V + \gamma_5) \bar{e}(x) \quad (2.173) \end{aligned}$$

wobei wir

$$\frac{\sqrt{2} g^2}{8 c \omega^2 \nu_w \pi_z^2} = G \quad (2.174)$$

benutzt haben. Uns interessiert hier nur der paritätsverletzende Anteil von H_{ee} . Dies sind nur die Terme in denen das eine Elektron vektoriell und das andere axialvektoriell an das Z_0 -Boson koppelt. Aus (2.173) erhalten wir daher :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ee}^{PV} &= \frac{G}{4\sqrt{2}} \quad 2C_V \quad \hat{e}(x) \gamma_\mu \hat{e}(x) \cdot \hat{e}(x) \gamma^\mu \gamma_5 \hat{e}(x) \\ &= \frac{GC_V}{2\sqrt{2}} \quad \hat{e}(x) \gamma_\mu \hat{e}(x) \cdot \hat{e}(x) \gamma^\mu \gamma_5 \hat{e}(x) \end{aligned} \quad (2.175)$$

Die Wechselwirkung eines Elektrons Ψ_b mit den übrigen Elektronen wird nun beschrieben durch die Summe aller Matricelemente :

$$\begin{aligned} \sum_s \langle \{v,s\} | \hat{H}_{ee}^{PV} | \{v,s\} \rangle &= \\ &= \sum_s \frac{GC_V}{2\sqrt{2}} \int d^4x \left\{ - \bar{e}_v(x) \gamma_\mu e_s(x) \cdot \bar{e}_s(x) \gamma^\mu \gamma_5 e_v(x) + \right. \\ &+ \bar{e}_v(x) \gamma_\mu e_v(x) \bar{e}_s(x) \gamma^\mu \gamma_5 e_s(x) + \bar{e}_s(x) \gamma_\mu e_s(x) \bar{e}_v(x) \gamma^\mu \gamma_5 e_v(x) - \\ &\left. - \bar{e}_s(x) \gamma_\mu e_v(x) \bar{e}_v(x) \gamma^\mu \gamma_5 e_s(x) \right\} \end{aligned} \quad (2.176)$$

Wir berücksichtigen nur die Null- Komponenten der Ströme, betrachten also nur die Coulomb- artige Wechselwirkung. Die vernachlässigten Terme sollten wie bei der elektromagnetischen Wechselwirkung sehr viel kleiner sein und sich außerdem fast vollständig gegeneinander

fortheben. Schließlich interpretieren wir (2.176) als Hartree- Fock-
 Matrixelement des Zustandes Ψ_b , setzen also :

$$\begin{aligned} \int dr \, f_v^{\dagger}(r) \hat{V}_{ee} f_v(r) &= \sum_s \langle \{v,s\} | \hat{H}_{ee}^{\text{PV}} | \{v,s\} \rangle = \\ &= \frac{G C_V}{2\sqrt{2}} \sum_{j_s, \mu_s} \int d\Omega \int r^2 dr \cdot \left\{ e_v^{\dagger} e_v \, e_s^{\dagger} \gamma_s e_s + \right. \\ &\quad \left. + e_s^{\dagger} e_s \, e_v^{\dagger} \gamma_s e_v - e_v^{\dagger} e_s \, e_s^{\dagger} \gamma_s e_v - e_s^{\dagger} e_v \, e_v^{\dagger} \gamma_s e_s \right\} \end{aligned} \quad (2.177)$$

Um die weiteren Umformungen zu vereinfachen benutzen wir folgenden
 Trick. Wir schreiben das Matrixelement (2.177) durch Einführung zu-
 sätzlicher Koordinaten und dazugehöriger Deltafunktionen um :

$$\begin{aligned} f_v^{\dagger}(r) \hat{V}_{ee} f_v(r) &= \frac{G C_V}{2\sqrt{2}} \sum_{j_s, \mu_s} r^2 \int d\Omega \int d\Omega' \, \delta(\varphi - \varphi') \cdot \\ &\quad \cdot \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta') \cdot \left\{ e_v^{\dagger}(r, \Omega) e_v(r, \Omega) \cdot \right. \\ &\quad \cdot e_s^{\dagger}(r, \Omega') \gamma_s e_s(r, \Omega') + e_s^{\dagger}(r, \Omega) e_s(r, \Omega) \cdot e_v^{\dagger}(r, \Omega') \gamma_s e_v(r, \Omega') \\ &\quad \left. - 2 \operatorname{Re} \left[e_v^{\dagger}(r, \Omega) e_s(r, \Omega) \, e_s^{\dagger}(r, \Omega') \gamma_s e_v(r, \Omega') \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.178)$$

und benutzen die Identität (Ja75)

$$\delta(\varphi - \varphi') \, \delta(\cos\vartheta - \cos\vartheta') = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L Y_{LM}(\Omega') \, Y_{LM}^*(\Omega) \quad (2.179)$$

Auf diese Weise erhalten wir Produkte von Matrixelementen der Kugelflächenfunktionen, z.B.

$$\int d\Omega \, e_v^+(r, \Omega) \, Y_{LM}^*(\Omega) \, e_v(r, \Omega) \cdot \\ \cdot \int d\Omega' \, e_s^+(r, \Omega') \, Y_{LM}(\Omega') \, e_s(r, \Omega') \quad (2.180)$$

Diese Ausdrücke lassen sich nun ganz analog zu denen in Abschnitt II.3.1 behandeln, auswerten. Wir setzen wieder

$$e_v(r, \Omega) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} i g_{\kappa_v}(r) \chi_{\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) - g_{-\kappa_v}(r) \chi_{-\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) \\ f_{\kappa_v}(r) \chi_{-\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) - i f_{-\kappa_v}(r) \chi_{\kappa_v}^{\mu_v}(\Omega) \end{pmatrix} \quad (2.181)$$

ein und erhalten :

$$\begin{aligned} \phi_v(r) \hat{V}_{ee} \phi_v(r) &= \frac{G C_v}{2\sqrt{2}} \sum_{S, L, M} \left\{ \langle \kappa_v \mu_v | Y_{LM}^* | \kappa_v \mu_v \rangle \cdot \right. \\ &\cdot \langle \kappa_s \mu_s | Y_{LM} | \kappa_s \mu_s \rangle \cdot \left[(g_{\kappa_v}^2 + g_{-\kappa_v}^2 + f_{\kappa_v}^2 + f_{-\kappa_v}^2) \cdot \right. \\ &\cdot (2 g_{\kappa_s} f_{-\kappa_s} + 2 g_{-\kappa_s} f_{\kappa_s}) + \\ &\left. \left. + 2 (g_{\kappa_v} f_{-\kappa_v} + g_{-\kappa_v} f_{\kappa_v}) \cdot (g_{\kappa_s}^2 + g_{-\kappa_s}^2 + f_{\kappa_s}^2 + f_{-\kappa_s}^2) \right] + \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle \kappa_v \mu_v | Y_{LM}^* | -\kappa_v \mu_v \rangle \langle \kappa_s \mu_s | Y_{LM} | -\kappa_s \mu_s \rangle \cdot \\
& \cdot \left[(i g_{\kappa_v} g_{-\kappa_v} - i g_{-\kappa_v} g_{\kappa_v} - i f_{\kappa_v} f_{-\kappa_v} + i f_{-\kappa_v} f_{\kappa_v}) \cdot (\dots) + \right. \\
& + (\dots) \cdot (i g_{\kappa_s} g_{-\kappa_s} - i g_{-\kappa_s} g_{\kappa_s} - i f_{\kappa_s} f_{-\kappa_s} + i f_{-\kappa_s} f_{\kappa_s}) \left. \right] - \\
& - 2 \langle \kappa_v \mu_v | Y_{LM}^* | \kappa_s \mu_s \rangle \langle \kappa_s \mu_s | Y_{LM} | \kappa_v \mu_v \rangle \cdot \\
& \cdot (g_{\kappa_v} g_{\kappa_s} + g_{-\kappa_v} g_{-\kappa_s} + f_{\kappa_v} f_{\kappa_s} + f_{-\kappa_v} f_{-\kappa_s}) \cdot \\
& \cdot (g_{\kappa_v} f_{-\kappa_s} + g_{-\kappa_v} f_{\kappa_s} + f_{\kappa_v} g_{-\kappa_s} + f_{-\kappa_v} g_{\kappa_s}) - \\
& - 2 \langle \kappa_v \mu_v | Y_{LM}^* | -\kappa_s \mu_s \rangle \langle -\kappa_s \mu_s | Y_{LM} | \kappa_v \mu_v \rangle \cdot \\
& \cdot (g_{\kappa_v} g_{-\kappa_s} - g_{-\kappa_v} g_{\kappa_s} - f_{\kappa_v} f_{-\kappa_s} + f_{-\kappa_v} f_{\kappa_s}) \cdot \\
& \cdot (-g_{\kappa_s} f_{\kappa_v} + g_{-\kappa_s} f_{-\kappa_v} + f_{\kappa_s} g_{\kappa_v} - f_{-\kappa_s} g_{-\kappa_v})
\end{aligned} \tag{2.182}$$

Hierbei wurde bereits benutzt, daß

$$\begin{aligned}
& \langle \kappa_v \mu_v | Y_{LM}^* | -\kappa_v \mu_v \rangle \langle \kappa_s \mu_s | Y_{LM} | \kappa_s \mu_s \rangle \sim \\
& \sim \pi(2\ell_v + 1 + L) \cdot \pi(2\ell_s + L) = 0
\end{aligned} \tag{2.183}$$

und

$$\langle \kappa_v \mu_v | Y_{LM}^\dagger | \kappa_v \mu_v \rangle \langle \kappa_s \mu_s | Y_{LM} | -\kappa_s \mu_s \rangle$$

(2.184)

verschwinden. Unter Verwendung der Vierer- Vektor- Notation und der Ergebnisse aus Abschnitt II.3.1, nämlich (2.136), (2.137), (2.149) und (2.150) erhalten wir

$$\begin{aligned} f_v^t(r) \hat{V}_{ee} f_v(r) &= \frac{G C_v}{2\sqrt{2}} \sum_{L,S} \left\{ [v, s]^{1/2} \frac{[L]}{4\pi} \cdot \right. \\ &\cdot \delta_{L0} \left(\frac{[s]}{[v]} \right)^{1/2} (f_v^t(r) \cdot f_v(r) \quad f_s^t(r) \cdot \Pi \cdot f_s(r) + \\ &\quad + f_s^t(r) \cdot f_s(r) \quad f_v^t(r) \cdot \Pi \cdot f_v(r)) - \\ &- 2 [v]^{-1} [v, s] \begin{pmatrix} v & s & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \pi (l_v + l_s + L) \cdot \frac{[L]}{4\pi} \cdot \\ &\quad \cdot f_v^t(r) \cdot f_s(r) \quad f_s^t(r) \cdot \Pi \cdot f_v(r) \\ &+ 2 [v]^{-1} [v, s] \begin{pmatrix} v & s & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \pi (l_v + l_s + L + 1) \cdot \frac{[L]}{4\pi} \cdot \\ &\quad \cdot f_v^t(r) \cdot \Gamma \cdot f_s(r) \quad f_s^t(r) \cdot \Gamma \Pi \cdot f_v(r) \Big\} \end{aligned}$$

(2.185)

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \Gamma = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.186)$$

Hieraus liest man als paritätsverletzenden Zusatzbeitrag zum Hartree-Fock-Potential

$$\begin{aligned} \hat{V}_{ee} f_v(r) = & \frac{G C_V}{8\sqrt{2} \pi} \sum_s [s] \left\{ f_s^t(r) \cdot \Pi f_s(r) f_v(r) + \right. \\ & \left. + f_s^t(r) \cdot f_s(r) \Pi f_v(r) - \right. \\ & - \sum_L [L] \begin{pmatrix} v & s & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \left[f_s^t(r) \cdot \Pi f_v(r) f_s(r) \Pi (l_s + l_v + L) + \right. \\ & \left. + f_s^t(r) \cdot f_v(r) \Pi f_s(r) \Pi (l_s + l_v + L) - f_s^t(r) \cdot \Gamma \Pi f_v(r) \cdot \right. \\ & \left. \cdot \Gamma f_s(r) \Pi (l_s + l_v + L + 1) - f_s^t(r) \Gamma f_v(r) \cdot \Gamma \Pi f_s(r) \Pi (l_s + l_v + L + 1) \right] \left. \right\} \quad (2.187) \end{aligned}$$

ab. Der Vergleich dieses Ausdrucks mit (2.160) zeigt, daß er genau die gleiche Struktur hat wie das gewöhnliche Hartree-Fock-Potential. Allerdings tritt in (2.187) kein Integral über r' auf, da die schwache Wechselwirkung als Punktwechselwirkung beschrieben wird. Auch hier zeigt sich, daß sich das Z_0 -Boson nur durch seine Masse vom Photon unterscheidet. Um die Bedeutung von Gleichung (2.187) noch etwas klarer zu machen, wollen wir wieder die entsprechenden störungstheoretischen Graphen angeben. Hierbei steht die doppelt-gestrichelte Linie jeweils für eine paritätsverletzende Z_0 -Wechselwirkung und die überstrichenen Zustände stehen wieder für die Beimischungen "falscher" Parität.

$$f_s^t \cdot f_s \Pi f_v \quad \longrightarrow \quad \begin{array}{c} \overline{v} \\ | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \\ v \end{array} \quad \bigcirc \quad s \quad (2.188)$$

$$\left. \begin{array}{l} f_s^t \cdot \pi f_v \quad f_s \\ f_s^t \Gamma f_v \quad \Gamma \pi f_s \end{array} \right\} \longrightarrow \text{Diagram (2.189)}$$

Diagram (2.189) shows a vertex labeled v on the left and a vertex labeled $\bar{v}$ on the right. A solid line connects the two vertices, forming a semi-circle. Above the semi-circle is a label $\bar{s}$. A dashed line connects the two vertices horizontally.

$$\left. \begin{array}{l} f_s^t \cdot \Gamma \pi f_v \quad \Gamma f_s \\ f_s^t f_v \quad \pi f_s \end{array} \right\} \longrightarrow \text{Diagram (2.190)}$$

Diagram (2.190) shows a vertex labeled v on the left and a vertex labeled $\bar{v}$ on the right. A solid line connects the two vertices, forming a semi-circle. Above the semi-circle is a label s . A dashed line connects the two vertices horizontally.

Bei der numerischen Lösung der Hartree- Fock- Gleichungen, wird (2.187) genau wie das elektromagnetische Hartree- Fock- Potential behandelt.

II.4. DIE ELEKTRON- PHOTON- WECHSELWIRKUNG

Als Lösung der Hartree- Fock- Gleichungen erhalten wir die vollständigen, vierkomponentigen Wellenfunktionen. Mit diesen Wellenfunktionen gilt es nun das $E1$ - Matrixelement zwischen dem $6s$ und $7s$ Zustand zu berechnen. (Wir behalten die übliche Bezeichnungsweise, die für die Paritätseigenzustände gilt, bei, obwohl es sich ja gerade um keine reinen s - Zustände mehr handelt.) Hierbei ist das Ergebnis abhängig von der Eichung, die für den elektrischen Dipoloperator gewählt wird. Den Grund für diese Eichabhängigkeit werden wir im ersten Abschnitt darlegen. Anschließend werden wir begründen, warum die Längeneichung die richtige für unser Problem ist und wir werden den elektrischen Dipoloperator in dieser Eichung angeben. Schließlich werden wir das $E1$ - und $M1$ - Matrixelement soweit es geht analytisch berechnen.

II.4.1. EICHABHÄNGIGKEIT VON HF-RECHNUNGEN

In diesem Abschnitt wollen wir zeigen, daß, während die Hartree- Fock- Rechnungen invariant sind gegen Eichtransformationen des Kern- Coulombfeldes, die Ankopplung an das externe Strahlungsfeld nicht in eichinvarianter Weise erfolgen kann. Der Grund hierfür ist, daß der Austauschterm des Hartree- Fock- Potentials alle Elektronenzustände mischt, während das Strahlungsfeld immer nur an den Anfangs- und Endzustand des betrachteten Übergangs koppelt. Um zu erklären, was damit gemeint ist, wollen wir folgenden Fall besprechen. Wir betrachten eine sogenannte V^{Z-1} - Hartree- Fock- Rechnung, das heißt ein System mit lauter gefüllten Schalen und einem einzigen Valenzelektron. Der Beitrag dieses Valenzelektrons zum Hartree- Fock- Potential wird vernachlässigt; daher V^{Z-1} im Unterschied zu V^Z . Des weiteren betrachten

wir einen Strahlungsübergang dieses Valenzelektrons. (Dies ist genau die Rechnung, die wir für Cäsium tatsächlich durchgeführt haben.) Wir können das Viererpotential nun in zwei Anteile aufspalten, von denen der erste $A_{Cb}^\mu = (\phi_{Cb}, \vec{A}_{Cb})$ das Coulomb- Feld des Kerns und der zweite $A_r^\mu = (\phi_r, \vec{A}_r)$ das Strahlungsfeld beschreibt. Während alle Elektronen mit A_{Cb}^μ wechselwirken, koppelt A_r^μ ausschließlich an das Valenzelektron. Die Dirac- Hartree- Fock- Gleichungen lauten demnach für die inneren Elektronen, die sogenannten core- Elektronen :

$$\begin{aligned} & \left[\vec{\alpha} \cdot (-ie \vec{\nabla} - e \vec{A}_{Cb}) + e \phi_{Cb} + \beta m - i \frac{\partial}{\partial t} \right] e_c(t, \vec{x}) = \\ & = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_{c'}(t, \vec{x}') e_c(t, \vec{x}) - \right. \\ & \quad \left. - e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_c(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}) \right\} \quad (2.191) \end{aligned}$$

und für die Zustände des Valenz- Elektrons

$$\begin{aligned} & \left[\vec{\alpha} \cdot (-ie \vec{\nabla} - e \vec{A}_{Cb} - e \vec{A}_r) + e \phi_{Cb} + e \phi_r + \beta m - i \frac{\partial}{\partial t} \right] e_v(t, \vec{x}) = \\ & = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_{c'}(t, \vec{x}') e_v(t, \vec{x}) - \right. \\ & \quad \left. - e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_v(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}) \right\} \quad (2.192) \end{aligned}$$

Die Indizes c und c' nummerieren hierbei die core- Zustände durch.

Wir betrachten nun getrennte Eichtransformationen von A_{Cb}^μ und A_r^μ . Diese Aufspaltung des Vektorpotentials ist möglich, weil sowohl die Dirac- Gleichung, als auch $F_{\mu\nu}$ gegen Eichtransformationen eines Teiles von A^μ :

$$A_\mu = A_\mu^{(1)} + A_\mu^{(2)} :$$

$$A_\mu^{(1)} \rightarrow A_\mu^{(1)} - \partial_\mu \Lambda^{(1)} \quad ; \quad e(x) \rightarrow \exp(i e \Lambda^{(1)}) \cdot e(x)$$

$$A_\mu^{(2)} \rightarrow A_\mu^{(2)} - \partial_\mu \Lambda^{(2)} \quad ; \quad e(x) \rightarrow \exp(i e \Lambda^{(2)}) \cdot e(x)$$

(2.193)

invariant sind. Daher ist es möglich, verschiedene Anteile des Vektor- Potentials getrennt zu transformieren.

Als erstes betrachten wir Eichtransformationen von A_{Cb}^μ .

$$A_{Cb}^\mu \rightarrow A_{Cb}^\mu - \partial_\mu \Lambda_{Cb} \quad ; \quad e_c(x) \rightarrow \exp(i e \Lambda_{Cb}) \cdot e_c(x) \\ e_v(x) \rightarrow \exp(i e \Lambda_{Cb}) \cdot e_v(x)$$

(2.194)

Beide Gleichungen, (2.191) und (2.192) sind invariant gegen diese Transformation. Diese Eichinvarianz bedeutet, daß alle "inneren", physikalischen Größen., wie z.B. die Hartree- Fock- Energien, nicht von der für das Kern- Potential verwendeten Eichung abhängen. Anders ist die Situation für A_r^μ . Hier läßt sich keine zu (2.194) analoge Transformation finden, die beide Gleichungen (2.191) und (2.192) invariant läßt.

So verändert z.B.

$$A_r^\mu \rightarrow A_r^\mu - \partial_\mu \Lambda_r \quad ; \quad e_c(x) \rightarrow e_c(x) \\ e_v(x) \rightarrow \exp(i e \Lambda_r) e_v(x)$$

(2.195)

die Gleichung (2.192) in

$$\begin{aligned}
 & \left[\vec{\alpha} \cdot (-i \vec{\nabla} - e \vec{A}_{cb} - e \vec{A}_r) + e \phi_{cb} + e \phi_v + \beta m - i \frac{\partial}{\partial t} \right] e_v(t, \vec{x}) = \\
 & = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_{c'}(t, \vec{x}') e_v(t, \vec{x}) - \right. \\
 & \quad \left. - \exp[i e (\mathcal{L}_r(\vec{x}') - \mathcal{L}_r(\vec{x}))] e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_v(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}) \right\}
 \end{aligned}
 \tag{2.196}$$

während (2.191) durch

$$\begin{aligned}
 A_r^\mu & \rightarrow A_r^\mu - \partial_\mu \mathcal{L}_r ; & e_c(x) & \rightarrow \exp(i e \mathcal{L}_r) e_c(x) \\
 & & e_v(x) & \rightarrow \exp(i e \mathcal{L}_r) e_v(x)
 \end{aligned}
 \tag{2.197}$$

abgewandelt wird zu

$$\begin{aligned}
 & \left[\vec{\alpha} \cdot (-i \vec{\nabla} + e \vec{\nabla} \mathcal{L}_r - e \vec{A}_{cb}) + e \phi_{cb} + \beta m - i \frac{\partial}{\partial t} \right] e_c(t, \vec{x}) = \\
 & = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_{c'}(t, \vec{x}') e_c(t, \vec{x}) - \right. \\
 & \quad \left. - e_{c'}^\dagger(t, \vec{x}') \cdot e_c(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}) \right\}
 \end{aligned}
 \tag{2.198}$$

Dies erklärt, wieso die numerischen Werte von Strahlungs-Matrixelementen, die man in Hartree-Fock-Näherung berechnet, von der für das Strahlungsfeld verwendeten Eichung abhängen. Gleichzeitig zeigen uns diese Überlegungen aber auch, wie man die Eichunabhängigkeit dieser Größen wiedergewinnen kann. Offensichtlich reicht es hierzu A^μ an alle Elektronen statt nur an das Valenzelektron anzukoppeln. Dann sind die Dirac-Hartree-Fock-Gleichungen invariant gegen (2.197). Durch die Mitnahme dieser weiteren Wechsel-

wirkungen kommt man von der Hartree- Fock- Näherung zur sogenannten Random- Phase- Näherung. Neben der direkten Kopplung



berücksichtigt man dort z.B. auch die folgenden Graphen :

$$(2.199)$$

Numerisch stellt man tatsächlich fest, daß die für unterschiedliche Eichungen in der Random- Phase- Approximation berechneten Werte weitgehend übereinstimmen (Jo83).

Die beschriebene Verletzung der Eichinvarianz tritt übrigens auch bei nicht- relativistischen Hartree- Fock- Rechnungen auf. Dies wollen wir an einem besonders übersichtlichen Beispiel demonstrieren.

In der sogenannten Längen- Eichung lautet der nicht- relativistische elektrische Dipoloperator

$$\hat{D}_L = - e \hat{r} \tag{2.200}$$

Dieser läßt sich durch folgende Umformung in die sogenannte Geschwindigkeitsform bringen. Aus

$$i [\hat{H}, \hat{r}]_- = \hat{p} \tag{2.201}$$

folgt

$$i(E_f - E_i) \langle \psi_f | \hat{\vec{r}} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | i[\hat{H}, \hat{\vec{r}}] | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \hat{\vec{p}} | \psi_i \rangle \quad (2.202)$$

und somit

$$\langle \psi_f | \hat{\vec{D}}_L | \psi_i \rangle = \frac{-i}{\omega} \langle \psi_f | \hat{\vec{p}} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \hat{\vec{D}}_V | \psi_i \rangle \quad (2.203)$$

mit dem elektrischen Dipoloperator in der Geschwindigkeits- Eichung:

$$\hat{\vec{D}}_V = \frac{-i}{\omega} \hat{\vec{p}} \quad ; \quad \omega = E_f - E_i \quad (2.204)$$

Gleichung (2.203) besagt also, daß die Längen- und Geschwindigkeits-Form des elektrischen Dipoloperators zu den gleichen Ergebnissen führen.

Für Hartree- Fock- Rechnungen gilt diese Ableitung jedoch nicht. Hier muß H ersetzt werden durch $H + V_{HF}$. Als nicht lokaler Operator vertauscht V_{HF} jedoch nicht mit " r ".

$$\hat{V}_{HF} \hat{\vec{r}} | \psi_i(r) \rangle = -e^2 \sum_c \int \frac{d^3 \vec{r}'}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \left\{ \langle \psi_c(r') | \psi_c(r') \rangle \hat{\vec{r}} | \psi_i(r) \rangle - \langle \psi_c(r') | \hat{\vec{r}} | \psi_i(r') \rangle | \psi_c(r) \rangle \right\} \quad (2.205)$$

$$\hat{\vec{r}} \hat{V}_{HF} | \psi_i(r) \rangle = -e^2 \sum_c \int \frac{d^3 \vec{r}'}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \left\{ \langle \psi_c(r') | \psi_c(r') \rangle \hat{\vec{r}} | \psi_i(r) \rangle - \langle \psi_c(r') | \psi_i(r') \rangle \hat{\vec{r}} | \psi_c(r) \rangle \right\} \quad (2.206)$$

Da die verschiedenen Eichungen also nicht äquivalent sind, stellt sich die Frage, welche wir für unsere Rechnung benutzen sollen. Glücklicherweise läßt sich darauf für den von uns untersuchten Übergang eine eindeutige Antwort finden. Wir betrachten einen Übergang mit sehr kleiner Frequenz

$$\omega \approx 4 \cdot 10^{-6}$$

in natürlichen Einheiten

Da die s-Wellenfunktion bei $r=50$ (in natürlichen Einheiten) bereits um mehr als sieben Größenordnungen abgefallen ist, ist der für das Matrixelement wichtige Wert ωr immer sehr klein

$$\omega \cdot r < 2 \cdot 10^{-4} \quad (2.207)$$

Gleichung (2.207) bedeutet nun, daß die emittierte Welle im Bereich des Atoms praktisch konstant ist. Daher sollte der statische elektrische Dipoloperator eine ausgezeichnete Näherung liefern. Der statische Dipoloperator ist aber eindeutig. Folglich muß man diejenige Eichung (bzw. diejenigen Eichungen) wählen, die sich für kleine Werte von ωr dem statischen Operator annähern. Dies tut von den gebräuchlichen Eichungen aber nur die Längen- Eichung, die daher die richtige für unser Problem ist.

Da wir uns nur für das E1- Matrixelement interessieren, wollen wir darauf verzichten die Multipolzerlegung des Strahlungsfeldes in extenso vorzuführen (man findet sie z.B. in (EG76) oder (Ro55)). Vielmehr geben wir gleich den von uns verwendeten Ausdruck für den elektrischen Dipoloperator in der Längen- Eichung an (Jo79).

$$\hat{E}_1^{\text{Längen-}} \Big|_M = -e \frac{\sqrt{r}}{\omega} \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{j}_2(\omega r) \sqrt{3} \vec{Y}_{1,2,M}(\Omega) + i \sqrt{2} Y_{1,M}(\Omega) \right] \quad (2.208)$$

mit den sphärischen Kugelvektorfunktionen

$$\vec{Y}_{L,L',M}(\Omega) = (-)^{L+M} \sqrt{2L+1} \sum_{\mu} \begin{pmatrix} 1 & L' & L \\ -\mu & M+\mu & -M \end{pmatrix} Y_{L'}^{M+\mu}(\Omega) \vec{\xi}_{-\mu}(\Omega)$$

(2.209)

Hierbei sind die $\vec{\xi}_\mu$ die sphärischen Einheitsvektoren.

$$\vec{\xi}_0 = \vec{e}_z \quad ; \quad \vec{\xi}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x \pm i \vec{e}_y) \quad (2.210)$$

man kann sich leicht überzeugen, daß der Operator (2.208) für $\omega \rightarrow 0$ tatsächlich in den statischen elektrischen Dipoloperator :

$$\left. \hat{E} 1_M \right|_{\text{statisch}} = -ie \frac{\sqrt{4\pi}}{3} |\hat{r}| Y_{1M}(\Omega) \quad (2.211)$$

übergeht. Schließlich sei noch der magnetische Dipoloperator in der Längeneichung angegeben. (Es sei bemerkt, daß der Faktor $\text{isgn}(\mu)$ häufig aus der Definition von M_1 herausgezogen wird.)

$$\left. \hat{M} 1_M \right|_{\substack{\text{Längen-} \\ \text{eichung}}} = e \frac{\sqrt{\pi}}{\omega} j_1(\omega r) \vec{Y}_{1,1,M}(\Omega) \cdot \vec{\alpha} \quad (2.212)$$

Für den Vergleich mit dem Experiment von Bouchiat et al. wird dieser zwar nicht benötigt, wir wollen aber explizit die Richtigkeit der Behauptungen (1.48) und (1.49) beweisen.

Aus unserer allgemeinen Analyse können wir nicht nur generell die Eichabhängigkeit der Matrixelemente folgern, sondern wir können sogar eine analytische Beziehung für die Differenz zwischen zwei in unterschiedlichen Eichungen berechneten Matrixelementen herleiten. Hierzu benötigen wir die modifizierte Kontinuitätsgleichung, die sich aus der Dirac- Hartree- Fock- Gleichung ergibt. Um diese zu erhalten, multiplizieren wir Gleichung (2.186) für den Zustand $e_{6s}(t,x)$ mit der Wellenfunktion $e_{7s}^+(t,x)$

$$\begin{aligned}
& e_{7s}^+(t, \vec{x}) \left[\vec{\alpha} \cdot (-i \vec{\nabla} - e \vec{A}_{cb} - e \vec{A}_r) + e \phi_{cb} + e \phi_r + \beta m - i \frac{\partial}{\partial t} \right] e_{6s}(t, \vec{x}) = \\
& = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^+(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}') e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{6s}(t, \vec{x}) \right. \\
& \quad \left. - e_{c'}^+(t, \vec{x}') e_{6s}(t, \vec{x}') e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{c'}(t, \vec{x}) \right\}
\end{aligned}
\tag{2.213}$$

und die hermitisch konjugierte Gleichung für $e_{7s}(t, x)$ mit $e_{6s}(t, x)$

$$\begin{aligned}
& e_{7s}^+(t, \vec{x}) \left[\vec{\alpha} \cdot (i \vec{\nabla} - e \vec{A}_{cb} - e \vec{A}_r) + e \phi_{cb} + e \phi_r + \beta m + i \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial t}} \right] e_{6s}(t, \vec{x}) = \\
& = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^+(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}') e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{6s}(t, \vec{x}) - \right. \\
& \quad \left. - e_{c'}^+(t, \vec{x}) e_{6s}(t, \vec{x}) e_{7s}^+(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}') \right\}
\end{aligned}
\tag{2.214}$$

Schließlich subtrahieren wir Gleichung (2.213) von Gleichung (2.214).

$$\begin{aligned}
& i \vec{\nabla} \cdot \left(e_{7s}^+(t, \vec{x}) \vec{\alpha} e_{6s}(t, \vec{x}) \right) + i \frac{\partial}{\partial t} \left(e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{6s}(t, \vec{x}) \right) = \\
& = -e^2 \sum_{c'} \int \frac{d^3 \vec{x}'}{|\vec{x}' - \vec{x}|} \left\{ e_{c'}^+(t, \vec{x}') e_{6s}(t, \vec{x}') e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{c'}(t, \vec{x}) - \right.
\end{aligned}$$

$$- e_{c_1}^+(t, \vec{x}) e_{c_s}(t, \vec{x}) e_{7s}^+(t, \vec{x}') e_{c_1}(t, \vec{x}') \} \quad (2.215)$$

Mit dieser Beziehung können wir nun den Unterschied zwischen Matrixelementen in verschiedenen Eichungen berechnen. Seien zwei beliebige Eichungen gegeben durch :

$$\begin{aligned} \vec{A}(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 1}} ; \quad \phi(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 1}} \\ \vec{A}(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 2}} ; \quad \phi(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 2}} \end{aligned} \quad (2.216)$$

Dann gibt es eine Funktion $\Lambda(t, \vec{x})$, so daß

$$\begin{aligned} \vec{A}(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 2}} &= \vec{A}(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 1}} + \vec{\nabla} \Lambda(t, \vec{x}) \\ \phi(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 2}} &= \phi(t, \vec{x}) \Big|_{\text{Eichung 1}} - \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(t, \vec{x}) \end{aligned} \quad (2.217)$$

Für die Differenz der Matrixelemente gilt dann :

$$\begin{aligned} \Delta &:= \langle 7s | e(\vec{\alpha} \cdot \vec{A} - \phi) \Big|_{\text{Eichung 2}} | 6s \rangle - \\ &\quad - \langle 7s | e(\vec{\alpha} \cdot \vec{A} - \phi) \Big|_{\text{Eichung 1}} | 6s \rangle = \\ &= e \int d^3 \vec{x} dt e_{7s}^+(t, \vec{x}) \left[\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{A} \Big|_{\text{Eichung 2}} - \vec{A} \Big|_{\text{Eichung 1}} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\phi \Big|_{\text{Eichung 2}} - \phi \Big|_{\text{Eichung 1}} \right) \right] e_{6s}(t, \vec{x}) \end{aligned} \quad (2.218)$$

Wir setzen Gleichung (2.217) ein und integrieren partiell :

$$\begin{aligned}
\Delta &= e \int d^3 \vec{x} dt \ e_{7s}^+(t, \vec{x}) \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \mathcal{L}(t, \vec{x}) + \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{L}(t, \vec{x}) \right) e_{6s}(t, \vec{x}) \\
&= -e \int d^3 \vec{x} dt \ \mathcal{L}(t, \vec{x}) \left[\vec{\nabla} \cdot (e_{7s}^+(t, \vec{x}) \vec{\alpha} e_{6s}(t, \vec{x})) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial}{\partial t} (e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{6s}(t, \vec{x})) \right]
\end{aligned}
\tag{2.219}$$

in diesen Ausdruck setzen wir (2.215) ein.

$$\begin{aligned}
\Delta &= -ie^3 \sum_{c'} \int dt \int \frac{d^3 \vec{x} d^3 \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \left\{ e_{c'}^+(t, \vec{x}') e_{6s}(t, \vec{x}') e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{c'}(t, \vec{x}) - \right. \\
&\quad \left. - e_{c'}^+(t, \vec{x}) e_{6s}(t, \vec{x}) e_{7s}^+(t, \vec{x}') e_{c'}(t, \vec{x}') \right\} \mathcal{L}(t, \vec{x}) = \\
&= -ie^3 \sum_{c'} \int dt \int \frac{d^3 \vec{x} d^3 \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} e_{c'}^+(t, \vec{x}') e_{6s}(t, \vec{x}') \cdot \\
&\quad \cdot e_{7s}^+(t, \vec{x}) e_{c'}(t, \vec{x}) \cdot \left\{ \mathcal{L}(t, \vec{x}) - \mathcal{L}(t, \vec{x}') \right\}
\end{aligned}
\tag{2.220}$$

Diese Gleichung ermöglicht es z.B., die Genauigkeit einer numerisch durchgeführten Rechnung zu überprüfen, indem man die Differenz der in unterschiedlichen Eichungen berechneten Matrixelemente mit Δ vergleicht.

11.4.2. DAS E1- UND M1- MATRIXELEMENT

Mit unserem Lösungsansatz (2.86) und (2.208) folgt :

$$\begin{aligned}
 \langle 7s | \hat{E}_1 | 6s \rangle &= \left. \begin{array}{c} \text{Längen-} \\ \text{gleichung} \end{array} \right| \\
 &= -e \frac{\sqrt{\pi}}{\omega} \int \frac{d^3 r}{r^2} \cdot \left\{ \sqrt{3} j_2(\omega r) \begin{pmatrix} -ig_{\kappa_7} \chi_{\kappa_7}^{M_7 \dagger} - g_{-\kappa_7} \chi_{-\kappa_7}^{M_7 \dagger} \\ f_{\kappa_7} \chi_{-\kappa_7}^{M_7 \dagger} + i f_{-\kappa_7} \chi_{\kappa_7}^{M_7 \dagger} \end{pmatrix}^t \right. \\
 &\quad \cdot \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\alpha} \begin{pmatrix} ig_{\kappa_6} \chi_{\kappa_6}^{M_6} - g_{-\kappa_6} \chi_{-\kappa_6}^{M_6} \\ f_{\kappa_6} \chi_{-\kappa_6}^{M_6} - i f_{-\kappa_6} \chi_{\kappa_6}^{M_6} \end{pmatrix} + \\
 &\quad + i \sqrt{2} j_1(\omega r) \begin{pmatrix} -ig_{\kappa_7} \chi_{\kappa_7}^{M_7 \dagger} - g_{-\kappa_7} \chi_{-\kappa_7}^{M_7 \dagger} \\ f_{\kappa_7} \chi_{-\kappa_7}^{M_7 \dagger} + i f_{-\kappa_7} \chi_{\kappa_7}^{M_7 \dagger} \end{pmatrix}^t \\
 &\quad \cdot Y_{1,M} \begin{pmatrix} ig_{\kappa_6} \chi_{\kappa_6}^{M_6} - g_{-\kappa_6} \chi_{-\kappa_6}^{M_6} \\ f_{\kappa_6} \chi_{-\kappa_6}^{M_6} - i f_{-\kappa_6} \chi_{\kappa_6}^{M_6} \end{pmatrix} \left. \right\} = \\
 &= -e \frac{\sqrt{\pi}}{\omega} \int \frac{d^3 r}{r^2} \left\{ \sqrt{3} j_2(\omega r) \cdot \right. \\
 &\quad \cdot \left[\langle \kappa_7 \mu_7 | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa_6 \mu_6 \rangle \cdot (-g_{\kappa_7} f_{-\kappa_6} - g_{\kappa_6} f_{-\kappa_7}) \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle -\kappa_7 \mu_7 | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa_6 \mu_6 \rangle \cdot (i g_{-\kappa_7} f_{-\kappa_6} + i f_{\kappa_7} g_{\kappa_6}) \\
& + \langle \kappa_7 \mu_7 | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | -\kappa_6 \mu_6 \rangle \cdot (-i g_{\kappa_7} f_{\kappa_6} - i f_{-\kappa_7} g_{-\kappa_6}) \\
& + \langle -\kappa_7 \mu_7 | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | -\kappa_6 \mu_6 \rangle \cdot (-g_{-\kappa_7} f_{\kappa_6} - f_{\kappa_7} g_{-\kappa_6})] \\
& + i\sqrt{2} j_1(\omega r) \left[\langle \kappa_7 \mu_7 | Y_{1M} | \kappa_6 \mu_6 \rangle \cdot (g_{\kappa_7} g_{\kappa_6} + \right. \\
& \quad \left. + g_{-\kappa_7} g_{-\kappa_6} + f_{\kappa_7} f_{\kappa_6} + f_{-\kappa_7} f_{-\kappa_6}) + \right. \\
& \quad \left. + \langle \kappa_7 \mu_7 | Y_{1M} | \kappa_6 \mu_6 \rangle \cdot (i g_{\kappa_7} g_{-\kappa_6} - i g_{-\kappa_7} g_{\kappa_6} - i f_{\kappa_7} f_{-\kappa_6} + i f_{-\kappa_7} f_{\kappa_6}) \right] \Bigg\}
\end{aligned}$$

(2.221)

Die auftretenden Matrixelemente von $\vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma}$ werden in Anhang D berechnet. Das Ergebnis lautet :

$$\langle \kappa' \mu' | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa \mu \rangle = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} (-)^{\frac{1}{2}-\mu} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ -\mu & M & \mu \end{pmatrix} \delta_{\kappa,1} \delta_{\kappa',1}$$

(2.222)

Außerdem gilt (siehe Anhang C) :

$$\langle \kappa \mu | Y_{1M} | \kappa' \mu' \rangle = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ -\mu & M & \mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} (-1)^{\frac{1}{2}+\mu} \quad (2.223)$$

Mit diesen Beziehungen vereinfacht sich Gleichung (2.221) zu

$$\begin{aligned} \langle 7s | \hat{E} 1_M \text{ Längen-} | 6s \rangle &= \frac{e}{\omega} \int dr \cdot \\ &\cdot \left\{ j_2(\omega r) (g_{-\kappa_7} f_{\kappa_6} + f_{\kappa_7} g_{-\kappa_6}) + \right. \\ &+ j_1(\omega r) (g_{-\kappa_7} g_{\kappa_6} - g_{\kappa_7} g_{-\kappa_6} + f_{\kappa_7} f_{-\kappa_6} - f_{-\kappa_7} f_{\kappa_6}) \left. \right\} \cdot \\ &\cdot (-1)^{\frac{1}{2}-\mu} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ -\mu_7 & M & \mu_6 \end{pmatrix} = \\ &= E 1 \quad (-1)^{\frac{1}{2}-\mu_7} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ -\mu_7 & M & \mu_6 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.224)$$

Das M1- Matricelement berechnet sich analog mit Hilfe von Gleichung (D.39) :

$$\begin{aligned} \langle 7s | -e \frac{\sqrt{\pi}}{\omega} j_1(\omega r) \vec{Y}_{1,1,M} \cdot \vec{e} | 6s \rangle &= \\ &= -i \frac{e}{\omega} \int dr j_1(\omega r) (g_{\kappa_7} f_{\kappa_6} + g_{-\kappa_7} f_{-\kappa_6} + \\ &+ f_{\kappa_7} g_{\kappa_6} + f_{-\kappa_7} g_{-\kappa_6}) \begin{array}{c} \frac{1}{2} \quad + \quad \frac{1}{2} \\ \mu_7 \quad \quad \mu_6 \\ 1 \quad M \end{array} = \\ &= M 1 \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ -\mu_7 & M & \mu_6 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.225)$$

Wir sehen, daß das reduzierte $E1$ -Matrixelement und das reduzierte $M1$ -Matrixelement offensichtlich rein imaginär sind. Diese hier abgeleiteten Eigenschaften von $E1$ und $M1$ wurden in Abschnitt I.3 verwendet.

Zum Abschluss dieses Abschnittes wollen wir festhalten :

Die Größe, die in dieser Arbeit berechnet werden soll, ist

$$E1 = \frac{e}{\omega} \int dr \left\{ j_2(\omega r) (g_{-\kappa_7} f_{\kappa_6} + f_{\kappa_7} g_{-\kappa_6}) + \right. \\ \left. + j_1(\omega r) (g_{-\kappa_7} g_{\kappa_6} - g_{\kappa_7} g_{-\kappa_6} + f_{\kappa_7} f_{-\kappa_6} - f_{-\kappa_7} f_{\kappa_6}) \right\} \quad (2.226)$$

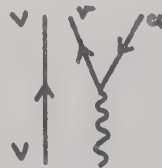
II.5. KORREKTUREN HÖHERER ORDNUNG

Natürlich stellt die bisher beschriebene Hartree- Fock- Rechnung nur eine näherungsweise Beschreibung der Elektron- Elektron- Wechselwirkung dar. In diesem Abschnitt wollen wir beschreiben, wie man die nächsthöhere Näherung, in der man 1 Teilchen- 1 Loch- Anregungen mitnimmt, berechnet. Obwohl wir eine solche Rechnung nicht durchgeführt haben, da bereits durch explizite Berechnung einzelner Graphen bekannt war, daß die Graphen höherer Ordnung für Cäsium keinen merklichen Beitrag liefern (Da82), haben wir die zu lösenden Gleichungen hergeleitet. Bei Rechnungen für andere Atome als Cäsium kann es sich sehr wohl als nötig erweisen, diese Gleichungen zu lösen, um eine hinreichend genaues Ergebnis zu erhalten.

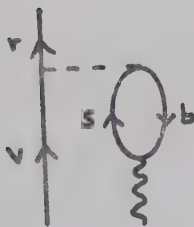
Als ersten Schritt malen wir uns alle Graphen auf, in denen durch die Wechselwirkung mit einem äußeren Photon maximal eine 1 Teilchen- 1 Loch- Anregung entsteht. Dabei stehen die Linien für Hartree- Fock- Zustände, d.h. die Graphen (2.147) sind in ihnen schon bis zu beliebiger Ordnung enthalten. Wir erhalten :



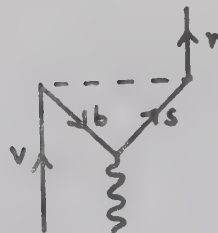
(0a)



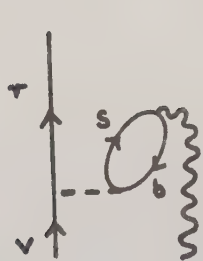
(0b)



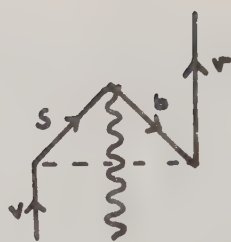
(1a)



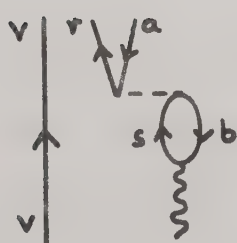
(1b)



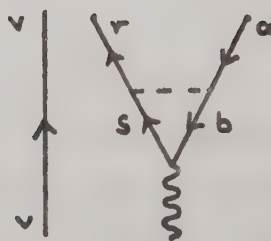
(1c)



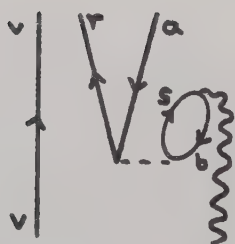
(1d)



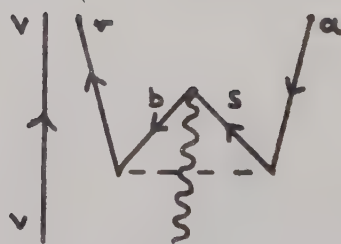
(2a)



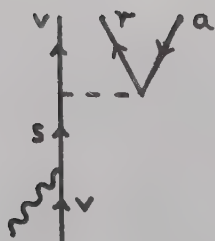
(2b)



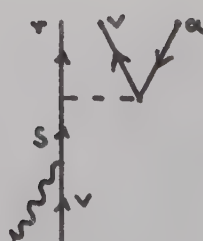
(2c)



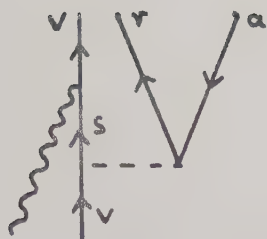
(2d)



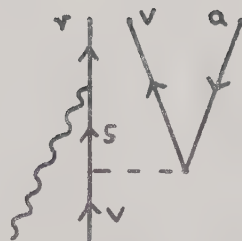
(3a)



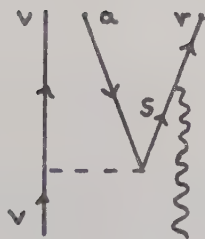
(3b)



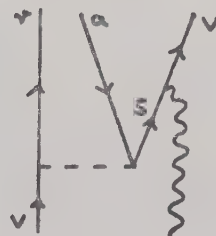
(3c)



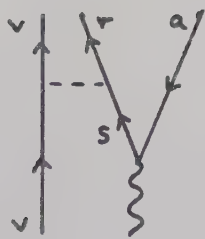
(3d)



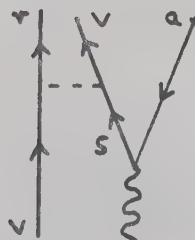
(4a)



(4b)



(4c)

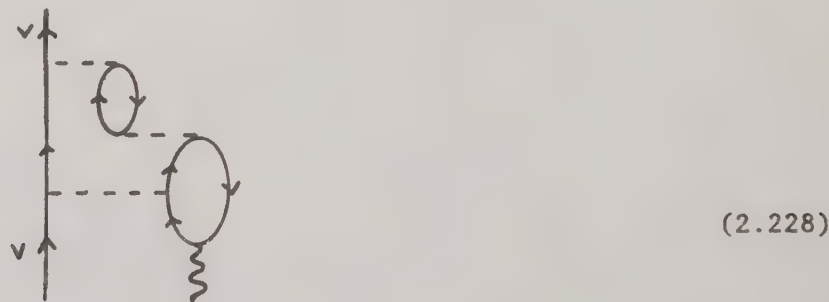


(4d)

(2.227)

Im Sinne einer Random- Phase- Approximation (RPA) wollen wir diese Graphen iterieren, so daß die erhaltenen Gleichungen alle Graphen berücksichtigen, in denen zu einem gegebenen Zeitpunkt maximal ein

Teilchen- Loch- Paar vorhanden ist. Zusätzlich werden alle Graphen der Art (2c) und (2d) mitgenommen. Der folgende Graph



soll also zum Beispiel enthalten sein, nicht aber



Graphisch läßt sich die hierzu nötige Iteration auf folgende Weise erzielen. Wir stellen die iterierten Wellenfunktionen durch Doppellinien dar.

für die iterierte Valenz- Wellenfunktion

(2.230)

für die zu größeren Zeiten iterierten
Core- Wellenfunktionen

(2.231)

für die zu kleineren Zeiten iterierten
Core- Wellenfunktionen

(2.232)

Die graphischen Iterations- Gleichungen lauten dann

$$\begin{array}{c} \text{[Diagram: A vertical rectangle with an upward arrow on its left side]} \end{array} = \begin{array}{c} \text{[Diagram: A single upward arrow]} \end{array} + \begin{array}{c} \text{[Diagram: A vertical rectangle with an upward arrow on its left side and a diagonal line with an arrow crossing it from bottom-left to top-right]} \end{array} + \begin{array}{c} \text{[Diagram: A vertical rectangle with an upward arrow on its left side and a diagonal line with an arrow crossing it from top-left to bottom-right]} \end{array} \tag{2.233}$$

$$\begin{array}{c} \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows. The middle line is shaded.]} \end{array} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows.]} \end{array} + \begin{array}{c} \text{[Diagram: A vertical rectangle with an upward arrow on its left side and a curved arrow connecting its bottom to a shaded rectangle below it.]} \end{array} + \begin{array}{c} \text{[Diagram: A curved arrow connecting a shaded rectangle on the left to a vertical rectangle with an upward arrow on its right side.]} \end{array} + \\ + \begin{array}{c} \begin{array}{c} v \quad r \quad q \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows. The middle line is shaded.]} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} v \quad r \quad \alpha \\ \text{[Diagram: A vertical rectangle with an upward arrow on its left side and a diagonal line with an arrow crossing it from bottom-left to top-right.]} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} v \quad r \quad b \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows. The middle line is shaded.]} \end{array} + \\ + \begin{array}{c} \begin{array}{c} r \quad v \quad b \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows. The first line is shaded.]} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} s \quad b \quad v \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows. The first line is shaded.]} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ \text{[Diagram: Three vertical lines with arrows. The middle line is shaded.]} \end{array} \end{array} \tag{2.234}$$

$$\begin{aligned}
 & \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} = \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \\
 & + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \\
 & + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} + \begin{array}{c} v \quad s \quad b \\ | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \\ \hline | \quad | \quad | \end{array} \quad (2.235)
 \end{aligned}$$

Das gesuchte Matrixelement wird berechnet aus

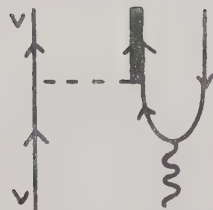
$$T_{fi} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \\ \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \\ \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \\ \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \\ \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \\ \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \\ \begin{array}{c} | \\ \hline | \\ \hline | \\ \hline | \end{array} \end{array} \quad (2.236)$$

Indem man immer wieder die Definitionsgleichungen (2.230) bis (2.232) in Gleichung (2.236) einsetzt, kann man sich überzeugen, daß dieser Ansatz tatsächlich die gewünschte Iteration liefert. So erhält man zum Beispiel :

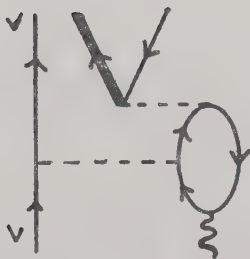
2.Term aus (2.236) :



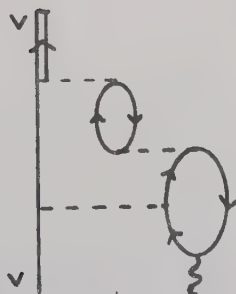
6.Term aus (2.234) :



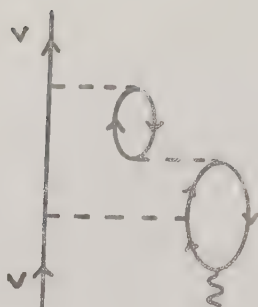
5.Term aus (2.234) :



2.Term aus (2.234) :



1. Term aus (2.233) :



(2.237)

Allerdings leistet dieser Ansatz nicht exakt das Beste. So werden die Graphen (3c), (3d), (4a) und (4b) aus (2.227) durch die Iteration nicht erzeugt. Außerdem werden einige Graphen höherer Ordnung doppelt gezählt. Die Gleichungen (2.233) bis (2.235) liefern also nur eine näherungsweise RPA- Rechnung. Dieser Ansatz hat sich jedoch in der Praxis bewährt (Jo83).

Die analytische Auswertung der graphischen RPA- Gleichungen ist sehr mühselig und wird in Anhang E beschrieben. Wir wollen hier nur das Ergebnis angeben. Wir führen folgende Bezeichnungsweise für die iterierten Radialfunktionen ein :



$$y_1(r)$$

(2.238)



$$y_e^+(r)$$

(2.239)



$$y_e^-(r)$$

(2.240)

Die einfachen Linien entsprechen den Hartree- Fock- Wellenfunktionen. Die zugehörigen Radialfunktionen werden als f_1 für das Valenzelektron und f_e für die Core- Elektronen bezeichnet. Diese Größen stehen für die in Gleichung (2.38) eingeführten vierkomponentigen Vektoren. Die betrachteten Ein- Teilchen- Ein- Loch- Anregungen werden durch den Index 1 numeriert : $1=1,2,3,\dots$. Diese An-

regungen werden charakterisiert durch die Hauptquantenzahlen, Gesamtdrehimpulse und Bahndrehimpulse von $f_e : n_1, j_1, l_1$ und $y_e : \bar{n}_1, \bar{j}_1, \bar{l}_1$.

Gleichung (2.236) lautet dann

$$E1 = \langle y_1 \| \hat{E}1 \| f_1 \rangle + \sum_n^L (-)^J [J_f, L]^{1/2} \cdot \left\{ \begin{matrix} j_i & j & j_f \\ \bar{j}_n & L & j_n \end{matrix} \right\} \cdot \left[(-)^{\bar{j}_n - j_n} \langle y_n^+ \| \hat{E}1 \| f_n \rangle + \langle f_n \| \hat{E}1 \| y_n^- \rangle \right] \quad (2.241)$$

Für die Gleichungen (2.233) bis (2.235) ergibt sich

$$(H_{HF} - \epsilon_1 - \omega) y_1 = \sum_{e, L_e} \sum_L (-)^{L + J_f + j_1} \left(\frac{[L_e]}{[J_f]} \right)^{1/2} \cdot \left\{ \begin{matrix} j_i & L & j_f \\ \bar{j}_e & L_e & j_e \end{matrix} \right\} F_L^+(y_e^+ f_e, f_1) + \quad (2.242)$$

$$+ \sum_{e, L_e} (-)^{L_e + \bar{j}_e + \bar{j}_1} [L_e, J_f]^{-1/2} F_{L_e}^+(f_1 f_e, y_e^+)$$

$$(H_{HF} - \epsilon_n - \omega) y_n^+ = - (-)^{\bar{j}_1 - j_1 + J} [J] \left(\frac{[J_n]}{[J_f]} \right)^{1/2} \cdot \left\{ \begin{matrix} j_i & j & j_f \\ \bar{j}_n & L_n & j_n \end{matrix} \right\} \cdot$$

$$\cdot \left([J]^{-1} F_J^+(y_1 f_1, f_n) - \sum_L (-)^{J - \bar{j}_1 + L - j_n} \left\{ \begin{matrix} \bar{j}_1 & j_i & j \\ j_n & \bar{j}_n & L \end{matrix} \right\} F_L^+(f_n f_1, y_1) \right.$$

$$\left. + \sum_{e, L_e} [J] [L_e, L_n]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_i & j & j_f \\ \bar{j}_e & L_e & j_e \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_i & j & j_f \\ \bar{j}_n & L_n & j_n \end{matrix} \right\} \right.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left([J]^{-1} \left[F_J^+ (y_e^+ f_e, f_n) + (-)^{\bar{J}_e - j_e} F_J^- (f_n, y_e^- f_e) \right] \right. \\
& + \sum_L (-)^{J - \bar{J}_e + L - j_n} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_e & j_e & J \\ j_n & \bar{J}_n & L \end{matrix} \right\} \cdot \\
& \cdot \left[F_L^+ (f_n f_e, y_e^+) + (-)^{\bar{J}_e - j_e} F_L^- (f_e f_n, y_e^-) \right] \Big) \\
& + \sum_{e, L_e} (-)^{\bar{J}_n - j_n + L + J - j_1} [L_n, L_e]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & L_n & L_e \\ j_n & j_1 & j_1 \end{matrix} \right\} \cdot \\
& \cdot \left\{ \begin{matrix} L & L_n & L_e \\ j_f & \bar{J}_n & \bar{J}_e \end{matrix} \right\} F_L^+ (f_1 f_1, y_e^+) \\
& + \sum_{e, L_e} [L_e, L_n]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_f & L_e & \bar{J}_e \\ L_n & j_n & j_1 \\ \bar{J}_n & j_1 & L \end{matrix} \right\} F_L^+ (y_e^+ f_1, f_1)
\end{aligned}$$

(2.243)

$$(H_{HF} - E_n + \omega) y_n^- = - (-)^{\bar{J}_1 - j_1 + \bar{J}_n - j_n + J} [J] \left(\frac{[J_e]}{[J_f]} \right)^{1/2} \cdot$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left[[J]^{-1} F_L^- (y_1 f_1, f_n) - \sum_L (-)^{J + L - \bar{J}_1 - \bar{J}_n} \left\{ \begin{matrix} \bar{J}_1 & j_1 & J \\ \bar{J}_n & j_n & L \end{matrix} \right\} F_L^- (f_1, y_1 f_n) \right] \\
& - \sum_{e, L_e} (-)^{\bar{J}_e - j_e} [J] [L_e, L_n]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_i & J & j_f \\ \bar{J}_e & L_e & j_e \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_i & J & j_f \\ \bar{J}_n & L_n & j_n \end{matrix} \right\} \cdot
\end{aligned}$$

(2.244)

$$\cdot \left[[J]^{-1} \left(F_J^- (f_n, y_e^+ f_e) \cdot (-)^{\bar{J}_n - j_n} + F_J^- (f_n, f_e y_e^-) \right) - \right.$$

$$- \sum_L (-)^{J+L-J_e-j_e} \left\{ \begin{matrix} J_e & j_e & J \\ J_n & j_n & L \end{matrix} \right\} .$$

$$\cdot \left(F_L^-(f_e, y_e^+ f_1) (-)^{J_e-j_e} + F_L^-(f_e f_n, y_e^-) \right)]$$

mit

$$\begin{aligned} G_L(rv, bs) &= \int F_L^+(f_r f_v, f_b) f_s(r) dr = \int F_L^+(f_r, f_b f_s) f_v(r) dr = \\ &= \int F_L^-(f_r f_v, f_s) f_b(r) dr = \int F_L^-(f_v, f_b f_s) f_r(r) dr \end{aligned}$$

(2.245)

($\varepsilon_1, \varepsilon_n$ sind die HF- Energien.)

Zur Lösung der RPA- Gleichungen muß man nun für festgehaltene Funktionen f_1 und f_e die vierkomponentigen Funktionen y_1, y_e^+ und y_e^- aus den Gleichungen (2.242) bis (2.244) selbstkonsistent berechnen. Die so gewonnenen Funktionen setzt man dann in Gleichung (2.241) ein, um das gewünschte Matrixelement zu erhalten.

II.6. DAS ELEKTRISCHE DIPOLMOMENT VON ATOMEN

Außer nach der von dem Glashow- Salam- Weinberg- Modell vorhergesagten Paritätsverletzung kann man in schweren Atomen auch nach anderen Symmetrieverletzungen suchen. Besonders interessant sind hierbei Effekte, die die CP- Invarianz verletzen, da das Glashow- Salam- Weinberg- Modell in seiner einfachsten Version diese Symmetrie erhält. Das Problem der CP- Verletzung ist deshalb so interessant, weil sie bisher in nur einem einzigen Fall beobachtet wurde, nämlich bei den neutralen Kaonen. Die Tatsache, daß in allen anderen Experimenten keine CP- Verletzung gefunden wird, schränkt die Möglichkeiten für theoretische Erklärungsmodelle immer weiter ein. Einige dieser Experimente bestimmen obere Schranken für das statische elektrische Dipolmoment neutraler Atome. (Vo84,Ca68,Go70) Das Auftreten eines solchen Dipolmoments verletzt die P- und T=CP- Symmetrie. Fast alle theoretische Modelle der CP- Verletzung sagen statische elektrische Dipolmomente der Nukleonen und Elektronen voraus (We76, Na79, Ga82a, Ga82b und Kr82). Diese sollten zu einer Polarisierung der Elektronenhülle und dadurch zu einem verstärkten elektrischen Dipolmoment der Atome führen. Es ist nun eine reizvolle und wichtige Aufgabe der Atomphysik, die Stärke dieser Polarisierung zu berechnen. Eine solche Rechnung ist zwar nicht Aufgabe dieser Arbeit, wir wollen hier aber trotzdem die Vorgehensweise kurz beschreiben, um zu demonstrieren, wie leicht sich die für die P- Verletzung durchgeführte Analyse auf andere Probleme übertragen läßt. Wir beschränken uns darauf, die Konsequenzen eines nicht- verschwindenden elektrischen Dipolmoments des Elektrons zu untersuchen. Die Auswirkungen eines elektrischen Dipolmoments der Nukleonen sind sehr viel schwieriger zu berechnen, da es hier zusätzlich zu einer Polarisierung des Kernes kommen kann (Ha83).

Für das zu untersuchende Problem ist es zweckmäßig, Atome mit einem einzelnen Valenzelektron zu betrachten, also z.B. Cäsium oder Tallium.

Salpeter (Sa58) hat gezeigt, wie sich ein statisches elektrisches Dipolmoment auf Lorentz-invariante Weise in die Dirac-Gleichung einfügen läßt. Dies geschieht durch den Zusatzterm

$$- d_e \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{E} \quad ; \quad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.246)$$

so daß die modifizierte Dirac-Gleichung in Hartree-Fock-Näherung

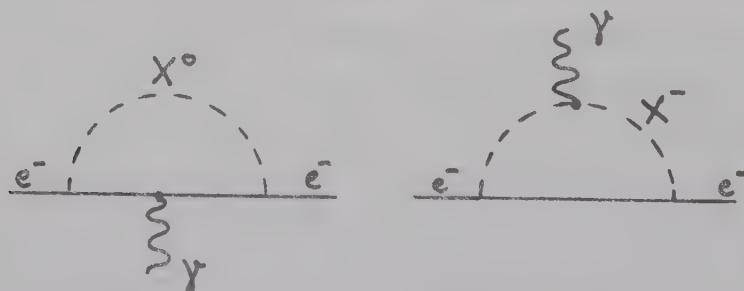
$$\left\{ \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m + V_{cb}(r) + \hat{V}_{HF}(r) - d_e \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{E}_{int} \right\} \psi = W \psi \quad (2.247)$$

$$(\sigma_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu} = 2 \vec{\Sigma} \cdot \vec{E})$$

lautet. Hierbei steht $\vec{E}_{int}$ für das interne elektrische Feld, das sich aus den Coulomb-Potential des Kernes und dem Hartree-Potential ergibt. Dieses ist rotationssymmetrisch.

$$\begin{aligned} \vec{E}_{int} \psi(t, \vec{r}) &= - \left[\vec{\nabla} (V_{cb}(r) + \hat{V}_H(r)) \right] \psi(t, \vec{r}) \\ &= \vec{E}_{int}(r) \cdot \psi(t, \vec{r}) \end{aligned} \quad (2.248)$$

Der physikalische Hintergrund von Gleichung (2.246) ist der folgende. Man geht davon aus, daß das elektrische Dipolmoment durch Wechselwirkungsgraphen der Art



$$(2.249)$$

zustande kommt. Dabei wollen wir die Art der Wechselwirkung und der X-Teilchen nicht weiter spezifizieren. Das einzige was man von dieser unbekannten CP- verletzenden Wechselwirkung fordert, ist Lorentzinvarianz und damit auch Rotationsinvarianz. Auf der anderen Seite zeichnet das Dipolmoment aber eine Richtung aus. Die einzige ausgezeichnete Richtung in einer rotationssymmetrischen Theorie ist die Quantisierungsrichtung des Drehimpulses. Für ein freies Elektron (d.h. Bahndrehimpuls gleich Null) heißt dies, daß

$$\vec{d}_e \sim \vec{s} \sim \vec{\sigma} \quad (2.250)$$

gelten muß. Genau diese Ergebnis werden wir in Kapitel V bei der Behandlung der starken CP- Verletzung erhalten. In Abschnitt II.1.2 haben wir bereits gezeigt, daß der Zusatzterm (2.246) tatsächlich rotationssymmetrisch ist und außerdem die P- und T- Symmetrie verletzt. Er erhält jedoch die C- Invarianz. Dort haben wir auch in Gleichung (2.63) den allgemeinen Lösungsansatz angegeben. Mit Hilfe der sphärischen Spinoren aus Gleichung (2.87) läßt sich dieser schreiben als

$$\psi_{CP} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} i g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^M(\Omega) + i g_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^M(\Omega) \\ f_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^M(\Omega) + f_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^M(\Omega) \end{pmatrix} \quad (2.251)$$

Wenn wir diesen Ansatz in Gleichung (2.247) einsetzen, können wir ganz analog zu den Schritten, die uns von Gleichung (2.86) zu Gleichung (2.97) geführt haben, die gekoppelten Gleichungen der Radialfunktionen herleiten. Das Ergebnis ist :

$$W g_{\kappa} = \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{r} \right) f_{\kappa} + (V_{cb} + \hat{V}_{HF} + m) g_{\kappa} - \hat{J}_{CP} g_{-\kappa} \quad (2.252a)$$

$$W g_{-\kappa} = \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r} \right) f_{-\kappa} + (V_{cb} + \hat{V}_{HF} + m) g_{-\kappa} - \hat{J}_{CP} g_{\kappa} \quad (2.252b)$$

$$W f_{\kappa} = - \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r} \right) g_{\kappa} + (V_{cb} + \hat{V}_{HF} - m) f_{\kappa} + \hat{J}_{CP} f_{-\kappa} \quad (2.252c)$$

$$W f_{-\kappa} = - \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{r} \right) g_{-\kappa} + (V_{cb} + \hat{V}_{HF} - m) f_{-\kappa} + \hat{J}_{CP} f_{\kappa} \quad (2.252d)$$

mit

$$\hat{J}_{CP}(r) \psi(t, \vec{r}) = de \left\{ \frac{\partial}{\partial r} [V_{cb}(r) + \hat{V}_H(r)] \right\} \psi(t, \vec{r}) \quad (2.253)$$

Man erkennt bereits, daß sich alle Schritte völlig analog zur Behandlung der paritätsverletzenden Elektron- Kern- Wechselwirkung wiederholen lassen. Bevor wir dies skizzieren, wollen wir aber noch auf eine der Konsequenzen der Unterschiede zwischen dem Ansatz für die CP- verletzende Wellenfunktion Ψ_{CP} , Gleichung (2.251), und dem Ansatz für die P- verletzende Wellenfunktion Ψ_P aus Gleichung (2.86)

$$\Psi_P = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} i g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^M(\Omega) - g_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^M(\Omega) \\ f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^M(\Omega) - i f_{-\kappa}(r) \chi_{\kappa}^M(\Omega) \end{pmatrix} \quad (2.254)$$

hinweisen. Betrachten wir hierzu die Kopplung eines $\Psi_P(\kappa=-1)$ - und eines $\Psi_{CP}(\kappa=-1)$ - an ein statisches äußeres elektrisches Feld

$$\vec{E}_{ex} = E_0 \vec{e}_z \quad (2.255)$$

Wir benutzen hierbei die Beziehung (C.14)

$$\int d\Omega \chi_{\kappa}^{\mu\dagger}(\Omega) \cos\vartheta \chi_{\kappa'}^{\mu'}(\Omega) = -\frac{2}{3} \mu \cdot \delta_{\mu\mu'} \delta_{\kappa,-\kappa'}$$

$$|\kappa| = |\kappa'| = 1 \quad (2.256)$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \int \Psi_p^+ (\kappa=-1, \mu) \cdot E_0 \cos\vartheta \cdot \Psi_p (\kappa=-1, \mu) r^2 dr d\Omega = \\ = -\frac{2}{3} \mu E_0 \int dr \left\{ -i g_{-1}(r) \cdot (-g_1(r)) - g_1(r) \cdot i g_{-1}(r) + \right. \\ \left. + f_{-1}(r) \cdot (-i f_1(r)) + i f_1(r) f_{-1}(r) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (2.257)$$

$$\begin{aligned} \int \Psi_{cp}^+ (\kappa=-1, \mu) \cdot E_0 \cos\vartheta \cdot \Psi_{cp} (\kappa=-1, \mu) r^2 dr d\Omega = \\ = -\frac{2}{3} \mu E_0 \int dr \left\{ -i g_{-1}(r) \cdot i g_1(r) - i g_1(r) \cdot i g_{-1}(r) + \right. \\ \left. + f_{-1}(r) \cdot f_1(r) + f_1(r) \cdot f_{-1}(r) \right\} = \\ = -\frac{4}{3} \mu E_0 \int dr \left\{ g_{-1}(r) \cdot g_1(r) + f_{-1}(r) \cdot f_1(r) \right\} \end{aligned} \quad (2.258)$$

Man sieht, daß aufgrund der unterschiedlichen Phasen vor den Radialfunktionen Ψ_p nicht an ein statisches elektrisches Feld koppelt und folglich keinen Zustand mit einem elektrischen Dipolmoment beschreiben kann, während dies für Ψ_{cp} sehr wohl möglich ist.

Aus dem Ansatz (2.251) erhält man das Hartree- Potential

$$V_H(r) = e^2 \sum_s [s] \int d r' \frac{1}{r_{>}} f_s^t(r') \cdot f_s(r') \quad (2.259)$$

und das Hartree- Fock- Potential

$$\begin{aligned} \hat{V}_{HF} \cdot f_b(r) = & \hat{V}_H \cdot f_b(r) - \sum_L \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \begin{pmatrix} b & s & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \cdot \\ & \cdot \left\{ f_s^t(r') \cdot f_b(r') \cdot f_s(r) \cdot \pi(\ell_s + \ell_b + L) + \right. \\ & \left. + f_s^t(r') \cdot \Gamma f_b(r') \cdot \Gamma f_s(r) \pi(\ell_s + \ell_b + L + 1) \right\} \end{aligned} \quad (2.260)$$

mit

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.261)$$

und

$$f_b(r) = \begin{pmatrix} g_{\kappa_b}(r) \\ g_{-\kappa_b}(r) \\ f_{\kappa_b}(r) \\ f_{-\kappa_b}(r) \end{pmatrix} \quad (2.262)$$

Die Rechnung erfolgt nun derart, daß man die HF- Gleichungen (2.252a) bis (2.252d) iterativ löst. Das numerische Verfahren hierzu wird in Kapitel III beschrieben.

Das Gesamt- Dipolmoment des Atoms ergibt sich laut Definition als Ableitung der Gesamtenergie nach der elektrischen Feldstärke. Mit

$$\vec{E}_{ex} = E_0 \vec{e}_z \longrightarrow A_{ex}^0 = E_0 z ; \vec{A}_{ex} = \vec{0} \quad (2.263)$$

also aus
$$\frac{\partial W_{\text{geo}}}{\partial E_0} = - D_z \quad (2.264)$$

Unter Verwendung der Beziehung

$$\begin{aligned} W_{\text{geo}} &= \sum_b W_b \int \psi_b^+(\vec{r}) \psi_b(\vec{r}) d^3r = \\ &= \sum_b \int \psi_b^+(\vec{r}) \left\{ \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta m + V_{cl}(\vec{r}) + e E_0 z + \hat{V}_{\text{HF}} - \right. \\ &\quad \left. - d_e \beta \vec{\Sigma} \cdot (\vec{E}_{\text{int}} + E_0 \vec{e}_z) \right\} \psi_b(\vec{r}) d^3r \quad (2.265) \end{aligned}$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} D_z &= - \sum_b \int \psi_b^+ \left\{ e z - d_e \beta \Sigma_3 \right\} \psi_b d^3r = \\ &= - \int \psi_{6s}^+(\vec{r}) \left\{ e r \cos \vartheta - d_e \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix} \right\} \psi_{6s}(\vec{r}) d^3r \quad (2.266) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde benutzt, daß sich die Beiträge aller geschlossenen Schalen gegenseitig fortheben, da der Ausdruck auf der rechten Seite von Gleichung (2.266) proportional zur magnetischen Quantenzahl ist. ψ_{6s} steht für das einzig beitragende Valenzelektron. Aus den experimentellen Grenzen für das elektrische Dipolmoment des Gesamtatoms (Ca68, Go70)

Cäsium :
$$|D_z| < 5.1 \pm 4.4 \cdot 10^{-20} \text{ e cm} \quad (2.267)$$

Thallium :
$$|D_z| < 1.3 \pm 2.4 \cdot 10^{-21} \text{ e cm} \quad (2.268)$$

kann man dann schließlich eine obere Grenze für d_e ableiten. Frühere einfachere Rechnungen (SS75) lassen erwarten, daß D_z für schwere Atome um einen Faktor 100 bis 1000 größer ist als d_e .

Mit diesem Abschnitt, der einen Eindruck von der Vielfalt der zu untersuchenden Fragen geben sollte, wollen wir die theoretische Analyse der Symmetrie- Verletzung in schweren Atomen beenden.

III. DIE NUMERISCHE BEHANDLUNG DES PROBLEMS

In diesem Kapitel wollen wir kurz beschreiben, mit welchen numerischen Techniken man die aus der theoretischen Behandlung gewonnenen gekoppelten Differentialgleichungen lösen kann. Wir gehen also davon aus, daß wir für das jeweilige Symmetrie- verletzende Problem einen Satz gekoppelter Radialgleichungen hergeleitet haben, für die wir auch die Randbedingungen (d.h. die asymptotischen Lösungen) kennen. Beispiele für solche Gleichungen sind :

- 1.) Gleichung (2.99) mit den Randbedingungen (2.124), (2,126) und (2.127); P-Verletzung in Cäsium
- 2.) Gleichung (2.252) mit den entsprechenden Randbedingungen; CP-verletzendes statisches elektrisches Dipolmoment des Elektrons und
- 3.) Gleichung (5.26) mit den Randbedingungen (5.30) und (5.34); starke CP-Verletzung.

Für die Wahl der numerischen Methoden ist es unerheblich, ob die einzelnen Wellenfunktionen zwei, vier oder acht reelle Komponenten besitzen, d.h. welche Art von Symmetrie- Verletzung beschrieben wird (vergleichen Sie Tabelle 3 auf Seite 57). Wichtig ist jedoch der Typ der Differentialgleichungen. Wir behandeln hier drei Fälle :

- 1.) homogene, lineare Differentialgleichungen, wie z.B. (5.34)
- 2.) Hartree- Gleichungen
- 3.) Hartree- Fock- Gleichungen

Wir beginnen mit der ersten Klasse, für die die Situation am einfachsten und übersichtlichsten ist.

III.1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Es gilt einen Satz von gekoppelten Differentialgleichungen derart zu integrieren, daß die vorgegebenen Randbedingungen erfüllt werden. Betrachten wir zunächst die Randbedingung am Ursprung, d.h. für $r \rightarrow 0$. Es wird gefordert, daß die erhaltene Lösung dort regulär ist, d.h. wie eine Potenz von r abfällt

$$\psi_{r \rightarrow 0} = O(r^{|x|}) \tag{3.1}$$

und nicht etwa proportional zu $r^{-|x|}$ ansteigt. Wir haben bereits für die einzelnen Beispiele diskutiert, wie man durch eine Potenzreihen-Entwicklung diese asymptotischen Lösungen findet. Je nach der Anzahl der Freiheitsgrade gibt es unterschiedlich viele linear unabhängige Lösungsfunktionen, die am Ursprung regulär sind. (siehe Tabelle 4, man vergleiche auch Tabelle 3)

erhaltene Symmetrien	Anzahl der reellen Funktionen	Anzahl der linear unabhängigen regulären Lösungen für $r \rightarrow 0$ bzw. $r \rightarrow \infty$
P,C und T	2	1
P,C oder T	4	2
keine	8	4

Tab.4: Die Anzahl der asymptotischen Lösungen

Man integriert nun für jede dieser asymptotischen Lösungen die Differentialgleichungen zu größeren Werten von r hin auf. Hierbei stellt sich die Frage, ob diese numerische Integration stabil ist, d.h. ob

Abweichungen von der exakten Lösung bei dieser schrittweisen Integration größer oder kleiner werden. Angenehmerweise wachsen in den betrachteten Fällen die gesuchten, regulären Anteile mit $r^{|x|}$ an, während die unerwünschten irregulären mit der inversen Potenz abfallen. Hierdurch nimmt jede ursprünglich vorhandene fehlerhafte Beimischung irregulärer Anteile sehr schnell ab. Wenn man daher dafür Sorge trägt, daß die Radialfunktionen am Ursprung um mehrere Größenordnungen anwachsen, kann man sicher sein, daß sie praktisch keine irregulären Anteile mehr enthalten. Ganz allgemein kann man sagen, daß die numerische Integration einer stark anwachsenden Funktion in der Regel unproblematisch ist.

Wir könnten nun jede der am Ursprung regulären Lösungen bis zum äußeren Rand des Integrationsgebietes integrieren und dann diejenige Linearkombination bestimmen, die die äußere Randbedingung erfüllt. Tatsächlich sind wir so bei der Behandlung der starken CP-Verletzung im MIT- Bag- Modell verfahren. Für Probleme aus der Atomphysik ist ein solches Vorgehen jedoch nicht möglich. Nach außen soll die gesuchte Lösung hier ja wie $e^{-\mu r}$, $\mu > 0$ abfallen, während die unerwünschten irregulären Lösungen mit $e^{\mu r}$ anwachsen. In diesem Fall wachsen daher numerische Fehler exponentiell an. Es empfiehlt sich deshalb, die Integration vom Ursprung bis zu einem bestimmten Radius, dem Matchingradius r_M , durchzuführen und anschließend, ausgehend von den asymptotischen Lösungen für große r die Differentialgleichungen von außen bis zu r_M aufzuintegrieren. Bei diesem Vorgehen wächst auch hierbei die gewünschte reguläre Lösung an, so daß der Integrationsfehler klein wird. r_M wählt man sinnvoller Weise in der Nähe des Maximums der integrierten Funktion.

Man erhält auf diese Weise eine, zwei oder vier linear unabhängige innere und äußere Versuchswellenfunktionen (vergleichen Sie Tabelle 4) und muß im nächsten Schritt diejenigen Linearkombinationen bestimmen, für die die Innen- und Außenlösungen am Matchingpunkt optimal übereinstimmen und die erhaltene Lösungsfunktion richtig normiert ist. Dieses Vorgehen ist möglich, weil für lineare, homogene Differentialgleichungen das Superpositionsprinzip gilt. Im nächsten Abschnitt werden wir beschreiben, wie man die gesuchten Linearkombinationen numerisch bestimmen kann. Aus

dem verbleibenden Mismatch kann man dann die nötige Energiekorrektur berechnen und mit der neuen Energie das beschriebene Vorgehen wiederholen, so lange bis die gewünschte Genauigkeit erreicht ist.

Die eigentliche numerische Integration erfolgte mit einem fertigen Programm (genannt DE), daß in dem Buch SG75 beschrieben ist. Dieses Programm wählt die benutzten Stützstellen selbständig und zwar derart, daß ein vorgegebener relativer Fehler nicht überschritten wird. Dies erlaubt eine besonders leicht Kontrolle des numerischen Integrationsfehlers. Das beschriebene Vorgehen ist in Figur 6 noch einmal schematisch dargestellt.

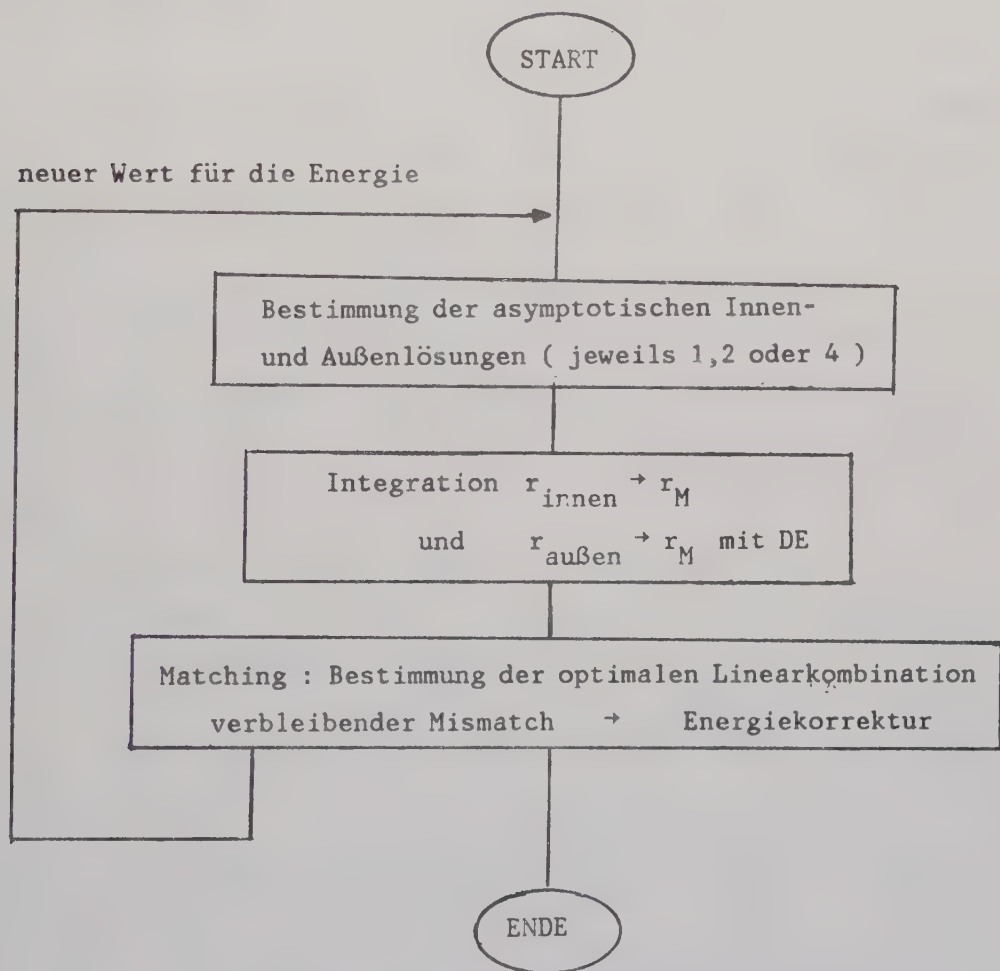


Fig.6 : Die Programmstruktur für gewöhnliche Differentialgleichungen

III.1.1. DAS MATCHING-VERFAHREN

Wie wir erläutert haben, stehen wir vor der Aufgabe, diejenige Linearkombination einer gewissen Anzahl innerer und äußerer Testfunktionen zu finden, für die der verbleibende Mismatch minimal wird. Hierzu verwenden wir eine trickreiche numerische Methode, die von P. Schlüter und K.-H. Wietschorke zur Behandlung der Zwei-Zentren-Dirac-Gleichung entwickelt und angewendet wurde. Da diese Methode noch nicht publiziert wurde, wollen wir sie in diesem Abschnitt darstellen. Sie funktioniert für eine beliebige Anzahl von linear unabhängigen Innen- und Außenlösungen.

Wir beschreiben zuerst die einzelnen Schritte und besprechen anschließend die Herleitung dieses Algorithmuses.

Sei V_I der von den Innenlösungen $f_1^I(r)$, $f_2^I(r)$, ..., $f_n^I(r)$ und V_A der von den Außenlösungen $f_1^A(r)$, $f_2^A(r)$, ..., $f_n^A(r)$ aufgespannte Vektorraum. In den von uns betrachteten Fällen ist entsprechend Tabelle 4 $n=1, 2$ oder 4 und die Anzahl der Komponenten von $f_i^I(r)$ und $f_i^A(r)$ ist dementsprechend $2, 4$ oder 8 . Es werden nun folgende Matrizen berechnet :

$$X_{ij} = \left(f_i^I(r_M) \right)^t \cdot f_j^I(r_M) \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (3.2)$$

$$Y_{ij} = \left(f_i^A(r_M) \right)^t \cdot f_j^A(r_M) \quad (3.3)$$

$$Z_{ij} = \left(f_i^I(r_M) \right)^t \cdot f_j^A(r_M) \quad (3.4)$$

Aus diesen berechnet man dann die Matrix

$$M = X^{-1} \cdot Z \cdot Y^{-1} \cdot Z^t \quad (3.5)$$

und bestimmt deren Eigenwerte und Eigenvektoren

$$\Pi_{ij} a_j = \lambda a_i \quad (3.6)$$

(Die n Eigenwerte liegen alle zwischen Null und Eins.)

Man wählt nun den zum größten Eigenwert gehörenden Eigenvektor

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

aus. Die gesuchte Innenlösung ist dann die Linearkombination

$$f_{\text{innen}}(r) = \sum_{i=1}^n a_i f_i^I(r) \quad ; \quad r \leq r_M \quad (3.8)$$

während sich die gesuchte Außenlösung aus

$$f_{\text{außen}}(r) = \sum_{i=1}^n b_i f_i^A(r) \quad ; \quad r_M \leq r \quad (3.9)$$

$$\vec{b} = Y^{-1} \cdot Z^t \cdot \vec{a} \quad (3.10)$$

bestimmt.

Um die Herleitung dieses Algorithmus übersichtlich zu gestalten, verwenden wir die folgenden Abkürzungen :

$$\vec{I}_i = f_i^I(r_M) \quad ; \quad \vec{A}_i = f_i^A(r_M) \quad i=1,2,\dots,n \quad (3.11)$$

$$\|\vec{I}_i\| = \sqrt{\sum_{k=1}^{2n} (I_i)_k^2} \quad (3.12)$$

(Man beachte, daß die $\vec{I}_i$ 2n- dimensionale Vektoren sind.) Die zu erfüllende Forderung lautet, daß der relative Mismatch zu minimieren ist. Seien also $\vec{I}$ und $\vec{A}$ Linearkombinationen der Art :

$$\vec{I} = \sum_{i=1}^n a_i \vec{I}_i \quad ; \quad \vec{A} = \sum_{i=1}^n b_i \vec{A}_i \quad (3.13)$$

so sollen diejenigen Koeffizienten a_i und b_i bestimmt werden, für die

$$\Delta = \frac{\|\vec{I} - \vec{A}\|}{\|\vec{I} + \vec{A}\|} \quad (3.14)$$

am kleinsten wird.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir

$$\|\vec{I}\| = 1 \quad ; \quad \vec{I} = \vec{e}_1 \quad (3.15)$$

wählen. (Wir können Zähler und Nenner durch $\|\vec{I}\|$ dividieren und anschließend $\frac{\vec{A}}{\|\vec{I}\|}$ in $\vec{A}$ umbenennen.)

$$\Delta = \frac{\|\vec{e}_1 - \vec{A}\|}{\|\vec{e}_1 + \vec{A}\|} = \frac{1 - 2 \cos \alpha \cdot \|\vec{A}\| + \|\vec{A}\|^2}{1 + 2 \cos \alpha \cdot \|\vec{A}\| + \|\vec{A}\|^2} \quad (3.16)$$

$$\cos \alpha = \vec{e}_1 \cdot \frac{\vec{A}}{\|\vec{A}\|} \quad (3.17)$$

Während $\|\vec{A}\|$ beliebig variiert werden kann, ist dies für α nicht möglich. Der Wertebereich von α hängt vielmehr von den Vektoren $\vec{I}_i$ und $\vec{A}_i$ ab. Daher können wir nur

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \|\vec{A}\|} = 0$$

nicht aber

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha} = 0$$

fordern.

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \|\vec{A}\|} = 4 \cos \alpha \frac{\|\vec{A}\|^2 - 1}{(1 + 2 \cos \alpha \cdot \|\vec{A}\| + \|\vec{A}\|^2)^2} = 0 \quad (3.18)$$

Da $\cos \alpha = 0$ ein Maximum von Δ liefert, erhalten wir aus (3.18)

$$\|\vec{A}\| = 1 \quad \longrightarrow \quad \Delta = \frac{1 - \cos \alpha}{1 + \cos \alpha} = \operatorname{tg}^2 \frac{\alpha}{2} \quad (3.19)$$

Da α zwischen null und neunzig Grad liegt, folgt also :

Zu bestimmen ist der kleinste erlaubte Wert für α

Man führt nun die Projektionsoperatoren

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1 &: V_I \longrightarrow V_A \\ \mathcal{P}_2 &: V_A \longrightarrow V_I \end{aligned} \quad (3.20)$$

ein. Die gesuchten Vektoren $\vec{I}$ und $\vec{A}$ sind nach dem eben Gesagten gerade die Vektoren aus V_I bzw. V_A für die

$$\vec{I} \cdot \vec{A} = \cos \alpha \quad (3.21)$$

maximal wird. (Es wird hierbei angenommen, daß $\vec{I}$ und $\vec{A}$ eindeutig sind.). Außerdem gilt

$$\mathcal{P}_1 \cdot \vec{I} = \cos \alpha \vec{A} \quad (3.22)$$

$$\mathcal{P}_2 \cdot \vec{A} = \cos \alpha \vec{I} \quad (3.23)$$

und somit

$$\mathcal{P}_2 \mathcal{P}_1 \cdot \vec{I} = \cos^2 \alpha \vec{I} \quad (3.24)$$

Man erhält $\vec{I}$ also als Eigenvektor zum größten Eigenwert der Matrix $P_2 P_1$. Aus $\vec{I}$ kann man dann mit (3.22) $\vec{A}$ berechnen.

Um Gleichung (3.24) auswerten zu können, benötigen wir also nur noch die beiden Projektionsoperatoren. Für P_1 gilt

$$(\vec{I} - P_1 \cdot \vec{I}) \cdot \vec{A}_j = 0 \quad j=1,2,\dots,n \quad (3.25)$$

Mit der Beziehung (3.22) lautet dies :

$$(\vec{I} - \cos \alpha \cdot \vec{A}) \cdot \vec{A}_j = 0 \quad (3.26)$$

Wir setzen nun Gleichung (3.13) ein und verwenden die Bezeichnungsweise (3.3) und (3.4).

$$\sum_i a_i \vec{I}_i \cdot \vec{A}_j = \cos \alpha \sum_i b_i \vec{A}_i \cdot \vec{A}_j \quad (3.27)$$

$$(Z^t)_{ji} a_i = \cos \alpha \gamma_{ji} b_i \quad (3.28)$$

Analog erhält man aus

$$(\vec{A} - P_2 \cdot \vec{A}) \cdot \vec{I}_j = 0 \quad j=1,2,\dots,n \quad (3.29)$$

unter Verwendung von (3.22), (3.13), (3.4) und (3.2)

$$Z_{ji} b_i = \cos \alpha \cdot X_{ji} a_i \quad (3.30)$$

Wir kombinieren die Gleichungen (3.28) und (3.30) zu der abschließenden Beziehung

$$(X^{-1} \cdot Z \cdot \gamma^{-1} \cdot Z^t)_{ji} a_i = \cos^2 \alpha \cdot a_j \quad (3.31)$$

Wie schon beschrieben, liefert der Eigenvektor $(a_1, a_2, \dots, a_n)$ zum größten Eigenwert $\cos^2 \alpha$ die Koeffizienten der im Innenraum zu wäh-

lenden Linearkombination. Die Koeffizienten für den Außenraum b_i sind aus Gleichung (3.28) zu berechnen.

$$b_i = \frac{1}{\cos \alpha} (Y^{-1} Z^t)_{ij} a_j \quad (3.32)$$

Damit ist die Herleitung des verwendeten Algorithmus beendet. Da die Vektoren $\vec{I}$ und $\vec{A}$ $2n$ -Komponenten haben, aber nur in den jeweils n -dimensionalen Unterräumen V_I und V_A frei gewählt werden können, wird i.A. ein nicht verschwindender Mismatch übrigbleiben. Dieser verschwindet nur, wenn man die richtige Energie und die richtigen asymptotischen Lösungen wählt. Umgekehrt läßt sich daher aus dem verbliebenen Mismatch die nötige Energiekorrektur berechnen. Wie dies geschieht, ist im nächsten Abschnitt dargestellt.

III.1.2. DIE BERECHNUNG DER ENERGIEKORREKTUR

Die zu integrierenden Radialgleichungen haben die folgende allgemeine Form :

$$\left[E - M_1 \frac{\partial}{\partial r} - M_2(r) \right] f(r) = 0 \quad (3.33)$$

Mit der Energie E , einer konstanten Matrix M_1 und einer r -abhängigen Matrix $M_2(r)$. Wenn man jedoch mit einem noch falschen Wert für E diese Gleichung integriert, erhält man eine Funktion $\tilde{f}(r)$, die einen Sprung aufweist. Wir können $\tilde{f}(r)$ daher in einen kontinuierlichen Beitrag $\tilde{f}_{\text{cont}}(r)$ und einen nicht- kontinuierlichen Beitrag zerlegen

$$\tilde{f}(r) = \tilde{f}_{\text{cont.}}(r) + \Delta \cdot \Theta(r - r_M) \quad (3.34)$$

Hierbei ist r_M der Matching- Radius, an dem der Sprung

$$\Delta = \phi^A(r_M) - \phi^I(r_M) \quad (3.35)$$

auftritt. Da man nicht über r_M hinweg integriert, wirkt d/dr nicht auf $\theta(r-r_M)$. Die gelösten Gleichungen sind also :

$$\left[E - M_1 \frac{\partial}{\partial r} - M_2(r) \right] \tilde{\phi}_{\text{cont.}}(r) = 0 \quad \text{für } r < r_M \quad (3.36)$$

$$\left[E - M_1 \frac{\partial}{\partial r} - M_2(r) \right] (\tilde{\phi}_{\text{cont.}}(r) + \Delta) = 0 \quad \text{für } r > r_M \quad (3.37)$$

Diese Gleichungen kann man zusammenfassen, wenn man den durch $d/dr \theta(r-r_M)$ verursachten Zusatzterm abzieht.

$$\left[E - M_1 \frac{\partial}{\partial r} - M_2(r) \right] \tilde{\phi}(r) + M_1 \Delta \cdot \delta(r-r_M) = 0 \quad (3.38)$$

Integriert man Gleichung (3.32) für einen anderen Energiewert E' , so erhält man entsprechend

$$\left[E' - M_1 \frac{\partial}{\partial r} - M_2(r) \right] \tilde{\phi}'(r) + M_1 \Delta' \cdot \delta(r-r_M) = 0 \quad (3.39)$$

Wir suchen nun dasjenige E' , für das Δ' gleich Null ist. Hierzu multiplizieren wir Gleichung (3.38) mit $\tilde{\phi}^t(r)$ und Gleichung (3.39) mit $\tilde{\phi}'^t(r)$ und integrieren über r .

$$\begin{aligned} E \int dr \tilde{\phi}^t(r) \tilde{\phi}(r) - \int dr \tilde{\phi}^t(r) \left(M_1 \frac{\partial}{\partial r} + M_2(r) \right) \tilde{\phi}(r) + \\ + M_1 \tilde{\phi}^t(r_M) \cdot \Delta = 0 \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$E' \int dr \tilde{\phi}'^t(r) \tilde{\phi}'(r) - \int dr \tilde{\phi}'^t(r) \left(M_1 \frac{\partial}{\partial r} + M_2(r) \right) \tilde{\phi}'(r) = 0$$

Wir subtrahieren beide Gleichungen voneinander und beachten, daß $\tilde{f}(v)$ und $\tilde{f}'(v)$ normiert sind.

$$E' - E = M_1 f^t(v_M) \cdot \Delta + I \quad (3.41)$$

$$I = \int \tilde{f}^t(v) \left(M_1 \frac{\partial}{\partial v} + M_2(v) \right) f(v) dv - \\ - \int \tilde{f}'^t(v) \left(M_1 \frac{\partial}{\partial v} + M_2(v) \right) \tilde{f}'(v) dv \quad (3.42)$$

Der entscheidende Punkt ist nun, daß I in vielen Fällen sehr klein ist. In diesen Fällen gestattet Gleichung (3.41) unmittelbar aus der bisherigen Energie und dem für diese erhaltenen Mismatch Δ die neue Energie zu berechnen.

$$E' = E + M_1 f^t(v_M) \cdot [f^A(v_M) - f^I(v_M)] \quad (3.43)$$

Für Anwendungen in der Atomphysik liefert (3.43) i.A. eine sehr schnelle Konvergenz der Energie. Dabei wird das Verfahren typischerweise funktionieren, wenn der ursprüngliche Fehler in der Energie kleiner ist als eine bestimmte Schranke ε . Ist die Unsicherheit in der zu wählenden Startenergie sehr viel größer als diese Schranke, so sollte man ein anderes Verfahren benutzen. Hier bieten sich alle Verfahren an, die die Nullpunkte der Funktion $\Delta(E)$ bestimmen. Wir sind so vorgegangen, daß wir mit einer Intervallschachtelung beginnen und, sobald die aus Gleichung (3.41) berechnete Energiekorrektur innerhalb des letzten Intervalls liegt, das Verfahren wechseln.

III.2. HARTREE- UND HARTREE-FOCK- GLEICHUNGEN

Die nicht- linearen Hartree- und die nicht- linearen und nicht- lokalen Hartree- Fock- Gleichungen löst man beide iterativ. Hierbei ist das Vorgehen für Hartree- Gleichungen demjenigen für gewöhnliche Differentialgleichungen noch ähnlich. Die Hartree- Gleichungen haben die allgemeine Form :

$$\left[E_i - M_1 \frac{\partial}{\partial r} + M_{2i}(r, f_1(r), f_2(r) \dots f_N(r)) \right] f_i(r) = 0$$

$$i = 1, 2, \dots, N \quad (3.44)$$

Man benötigt nun einen Satz von Näherungslösungen $f_i^{(0)}(r)$ und die dazugehörigen Startenergien $E_i^{(0)}$. Von diesen ausgehend iteriert man Gleichung (3.44) gemäß :

$$\left[E_i^{(n)} - M_1 \frac{\partial}{\partial r} + M_{2i}(r, f_1^{(n)}(r), f_2^{(n)}(r), \dots, f_N^{(n)}(r)) \right] f_i^{(n+1)}(r) = 0$$

$$(3.45)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

Die Iteration der Energie erfolgt wie im letzten Abschnitt beschrieben wurde, also etwa gemäß

$$E_i^{(n+1)} = E_i^{(n)} + M_1 [f_i^{(n+1)}(r_M)]^2 \cdot (f_i^{A(n+1)}(r_M) - f_i^{I(n+1)}(r_M))$$

$$(3.46)$$

Da die Differentialgleichungen (3.45) homogen und linear sind, können wir das in Abschnitt III.1 beschriebene Verfahren übernehmen, mit der einzigen Änderung, daß außer der Energie E_i auch das Hartree- Potential $V_{H,i}(r)$ iteriert wird.

Versucht man, Hartree- Fock- Gleichungen auf analoge Weise zu lösen, so muß man (3.45) durch

$$\begin{aligned} [E_i^{(n)} - M_1 \frac{\partial}{\partial r} + M_2(r, f_1^{(n)}(r), f_2^{(n)}(r) \dots f_N^{(n)}(r))] f_i^{(n+1)}(r) = \\ = M_{3i}(r, f_1^{(n)}(r), f_2^{(n)}(r), \dots f_N^{(n)}(r)) \end{aligned} \quad (3.48)$$

ersetzen. Diese Gleichungen sind jedoch nicht mehr homogen, so daß für die Lösungen das Superpositionsprinzip nicht mehr gilt. Die bisher benutzten Methoden können hier also nicht verwendet werden.

Um solche Gleichungen zu lösen wurden im Laufe der Zeit viele, zum Teil sehr raffinierte Techniken entwickelt. (Beispiele sind Gr80 und BB73.) Für unsere Zwecke reicht es zu wissen, daß heute in den Programmbibliotheken eine Reihe sehr effizienter HF-Programme zur Verfügung stehen, die uns die gewöhnlichen HF- Wellenfunktionen und HF- Energien liefern. ("Gewöhnlich" heißt hier ohne Berücksichtigung symmetrieverletzender Zusatzwechselwirkungen.). Wir wählen nun als Startenergien für die Iteration (3.48) die mit einem solchen Standard- HF-Programm gewonnenen Werte. Als Startfunktionen für die Komponenten von $f_i^{(n)}(r)$, die den gewöhnlichen Wellenfunktionen entsprechen wählen wir die dazugehörigen HF-Wellenfunktionen. Die Startfunktionen für die durch die Symmetrie- Verletzung hinzugekommenen Komponenten erhalten wir schließlich aus einer zuvor durchgeführten Hartree-Rechnung. Da die Energiekorrektur von zweiter Ordnung in der, in allen betrachteten Fällen sehr schwachen, Zusatzwechselwirkung ist, brauchen wir E_i überhaupt nicht zu iterieren, d.h. wir können Gleichung (3.48) ersetzen durch :

$$\begin{aligned} [E_i - M_1 \frac{\partial}{\partial r} + M_2(r, f_1^{(n)}(r), f_2^{(n)}(r) \dots f_N^{(n)}(r))] f_i^{(n+1)}(r) = \\ = M_{3i}(r, f_1^{(n)}(r), f_2^{(n)}(r), \dots f_N^{(n)}(r)) \end{aligned} \quad (3.49)$$

Diese Gleichung lösen wir, indem wir im Innen- und Außenraum jeweils eine inhomogene Lösung und je nach Problem ein, zwei oder vier homogene, linear unabhängige Versuchslösungen berechnen.

$$\begin{aligned} f_{\text{inhomogen}}^I(r) ; f_{\text{homogen},1}^I(r), f_{\text{homogen},2}^I(r), \dots \\ f_{\text{inhomogen}}^A(r) ; f_{\text{homogen},1}^A(r), f_{\text{homogen},2}^A(r), \dots \end{aligned} \quad (3.50)$$

Wir bestimmen dann jeweils diejenigen Linearkombinationen der homogenen Lösungen, die man zu $f_{\text{inhomogen}}^I(r)$ bzw. $f_{\text{inhomogen}}^A(r)$ addieren muß, um den Mismatch zu minimieren.

$$f^I(r) = f_{\text{inhomogen}}^I(r) + \sum_i a_i f_{\text{homogen},i}^I(r)$$

$$f^A(r) = f_{\text{inhomogen}}^A(r) + \sum_i b_i f_{\text{homogen},i}^A(r)$$

$$\Delta = \frac{\|f^A(r_M) - f^I(r_M)\|}{\|f^A(r_M) + f^I(r_M)\|} \quad \text{ist minimal} \quad (3.51)$$

Der verbleibende Mismatch, der im Prinzip die Energiekorrektur liefert, muß hierbei sehr klein werden (anderenfalls liegt ein Programmierfehler vor). Das Gesamtschema unserer Rechnung für Cäsium ist in Figur 7 dargestellt.

Wir wollen die Einzelheiten dieses insgesamt recht umfangreichen Programms nicht näher darstellen, sondern nur noch auf einen Punkt eingehen, der von allgemeinem Interesse sein könnte. Aus den Bemerkungen in Abschnitt III.1 zur numerischen Stabilität bei der Integration von Differentialgleichungen sollte klar geworden sein, daß es empfehlens-

wert ist, den Matchingradius r_M so zu wählen, daß dort die verschiedenen Komponenten alle möglichst groß sind. Im Allgemeinen wählt man daher den klassischen Umkehrpunkt. In dem von uns betrachteten Problem ist dies jedoch nur für die Komponenten "richtiger" Parität sinnvoll. Die Komponenten "falscher" Parität sind dagegen meistens in der Nähe des Kernrandes am größten, da sie ja auf die Elektron- Kern- Wechselwirkung durch neutrale Ströme zurückgehen (Siehe Figur 11 im nächsten Kapitel.). Ihr Maximum kann jedoch auch hier in der Nähe des klassischen Umkehrpunktes (und sogar noch darüber hinaus, vergleiche Figur 10) liegen. Die Gründe hierfür werden wir im nächsten Kapitel diskutieren. Hier sei nur darauf hingewiesen, daß es daher sinnvoll ist, mit mehreren Matchingpunkten zu arbeiten. (Dies ist möglich, da die "richtigen" und "falschen" Komponenten außerhalb des Kerns entkoppeln.) So empfiehlt es sich z.B., für den $1s$ - Zustand die Komponenten "falscher" Parität am Kernrand und diejenigen "richtiger" Parität am klassischen Umkehrpunkt zu matchen. Das verwendete Verfahren ändert sich hierdurch nicht prinzipiell. So wird Gleichung (3.43) einfach durch

$$E' = E + M_1 \cdot \left[f^t(r_{M,1}) \cdot (f^A(r_{M,1}) - f^I(r_{M,1})) + \right. \\ \left. + f^t(r_{M,2}) \cdot (f^A(r_{M,2}) - f^I(r_{M,2})) \right] \quad (3.52)$$

ersetzt.

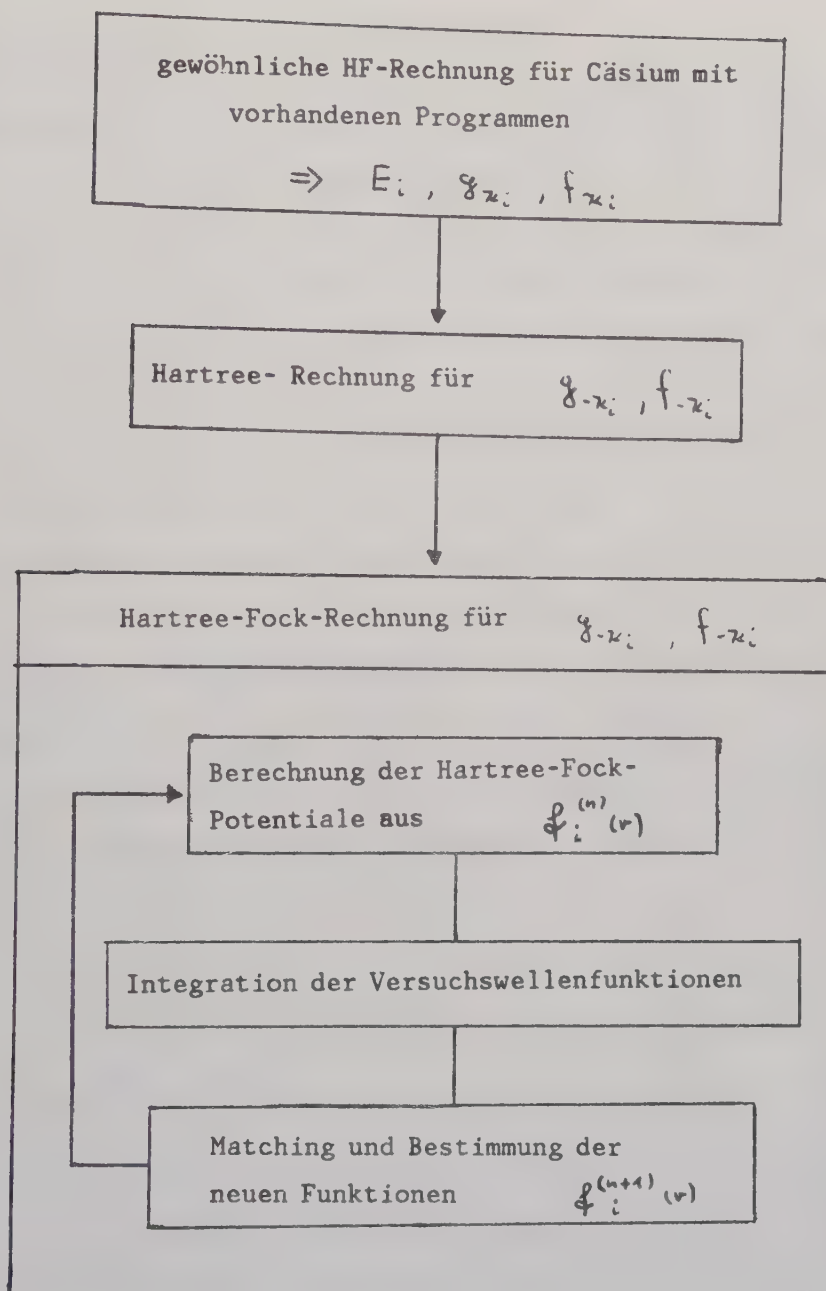


Fig.7 : Das Schema der durchgeführten HF-Rechnung

IV. DIE ERGEBNISSE DER HF-RECHNUNG FÜR CÄSIUM

Wir haben gesehen, daß durch die paritätsverletzende Elektron- Kern- Wechselwirkung zu jeder Wellenfunktion ein Beitrag mit entgegengesetzter Parität und gleichem Gesamtdrehimpuls gemischt wird. Wir werden in diesem Kapitel besprechen, wie man die Gestalt dieser beigemischten Radialfunktionen im einzelnen verstehen kann. Wir gehen hierzu folgendermaßen vor. Wir beginnen mit dem allereinfachsten Fall, in dem die Elektron- Elektron- Wechselwirkung überhaupt vernachlässigt wird, besprechen dann die in Hartree- Näherung erhaltenen Resultate und schließlich die Konsequenzen des nicht- lokalen Austauschtermes des Hartree- Fock- Potentials.

Für einen Punktkern und bei Vernachlässigung der Elektron- Elektron- Wechselwirkung sind die Energien der Zustände mit gleichem Gesamtdrehimpuls und gleicher Hauptquantenzahl, aber unterschiedlicher Parität entartet. Wir betrachten zum Beispiel die beiden zusammengehörigen Zustände 6s und 6p. Aufgrund der energetischen Entartung ist die g_{-k} -Komponente des 6p- Zustandes einfach proportional zur g_k - Komponente des 6s- Zustandes. (Siehe Figur 8) Für die anderen Komponenten gilt entsprechend :

$$f_{-k}(6s) \sim f_k(6p) , g_{-k}(6s) \sim g_k(6p) ,$$

$$\text{und} \quad f_{-k}(6p) \sim f_k(6s)$$

Nur im Bereich des Kernes weichen sie voneinander ab. Dies werden wir weiter unten besprechen. Interessant sind auch die Fälle, in denen der zu dem betrachteten Zustand gehörende Zustand entgegengesetzter Parität nicht existiert. Dies ist zum Beispiel beim 1s- Zustand der Fall. Hier fällt die durch die Elektron- Kern- Wechselwirkung erzeugte Störung nach außen einfach exponentiell ab. (Man vergleiche hierzu Figur 11.)

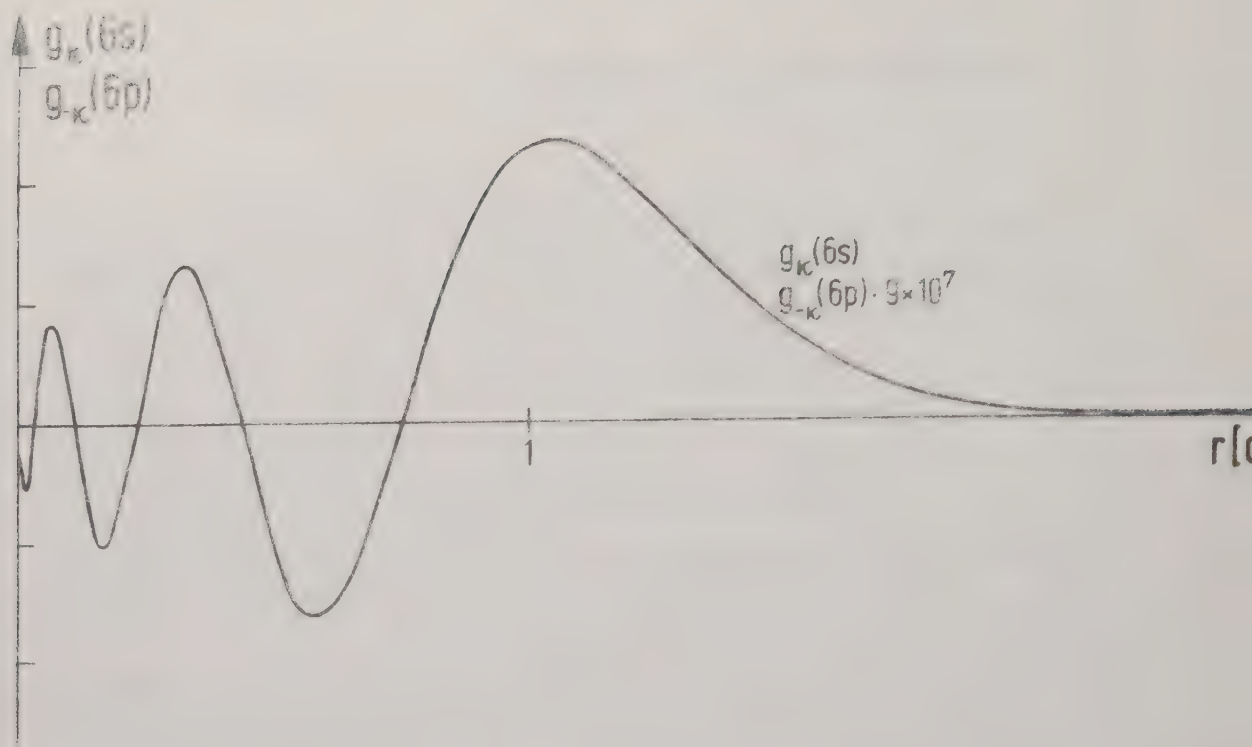


Fig.8 : Die g_k -Komponente der 6s-Wellenfunktion und die g_{-k} -Komponente der 6p-Wellenfunktion für wasserstoff-ähnliches Cäsium.

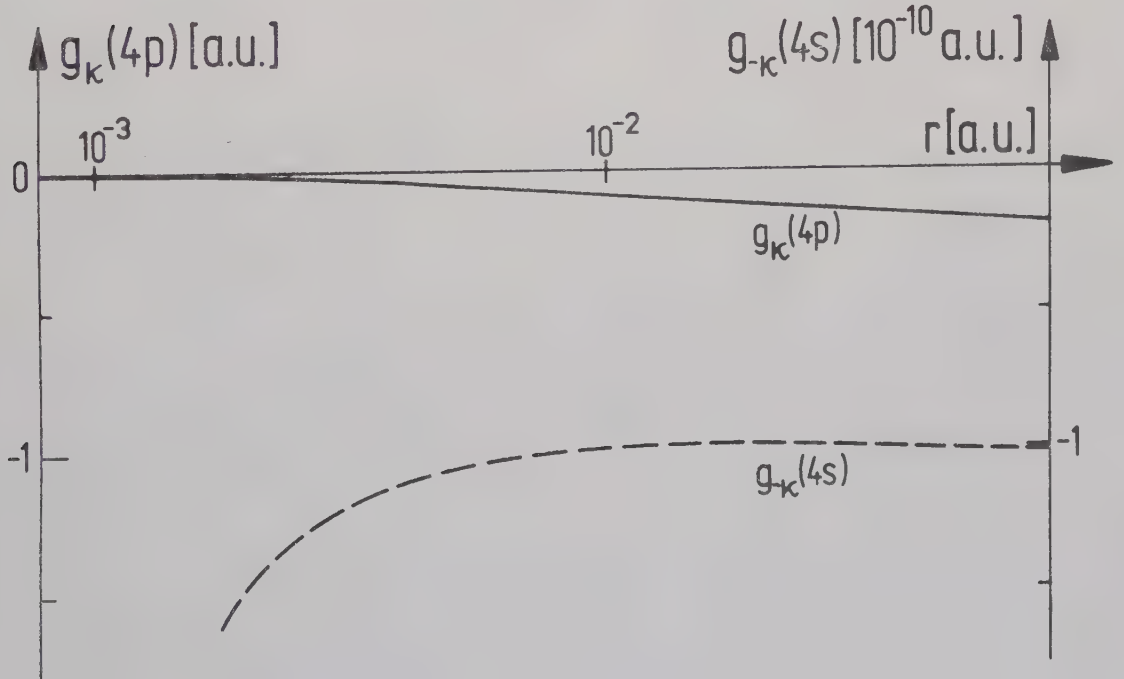
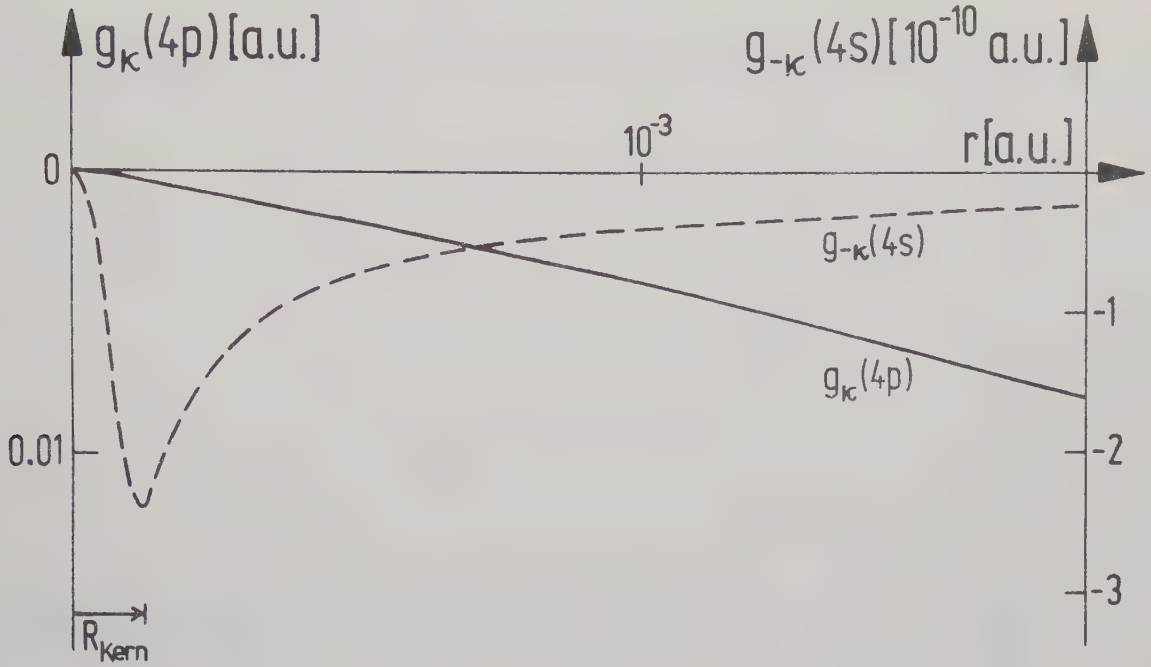
Bei Rechnungen in Hartree-Näherung ergibt sich qualitativ dasselbe Bild, allerdings sind nun die Energien nicht mehr entartet. Daher sind die einander entsprechenden Wellenfunktionen wie z.B. $g_{-k}(6p)$ und $g_k(6s)$ nicht mehr proportional zueinander, sondern nur ähnlich. Die auftretenden Abweichungen sind um so größer, je größer die Energiedifferenz der beiden Zustände ist.

Man kann diesen Befund auch leicht im Rahmen der Störungstheorie verstehen. Diese liefert für die beigemischte Wellenfunktion :

$$|i\rangle_{p.v.} = \sum_j \frac{|j\rangle \langle j| H_{p.v.} |i\rangle}{E_j - E_i} \quad (4.1)$$

Hierbei ist nicht nur über alle gebundenen Zustände zu summieren, sondern auch über die Kontinuumszustände. (Da die Störung $H_{p.v.}$ extrem kurzreichweitig ist, nämlich weniger als 10fm, muß man damit rechnen, daß Zustände bis zur Energie $E=hc/10fm=20\text{MeV}$ merklich beitragen.)

Gleichung (4.1) zeigt deutlich, daß für kleine Werte von $E_{4s} - E_{4p}$ die Beimischung "falscher" Parität proportional ist zu den Komponenten "richtiger" Parität der jeweils zugehörigen Wellenfunktion.



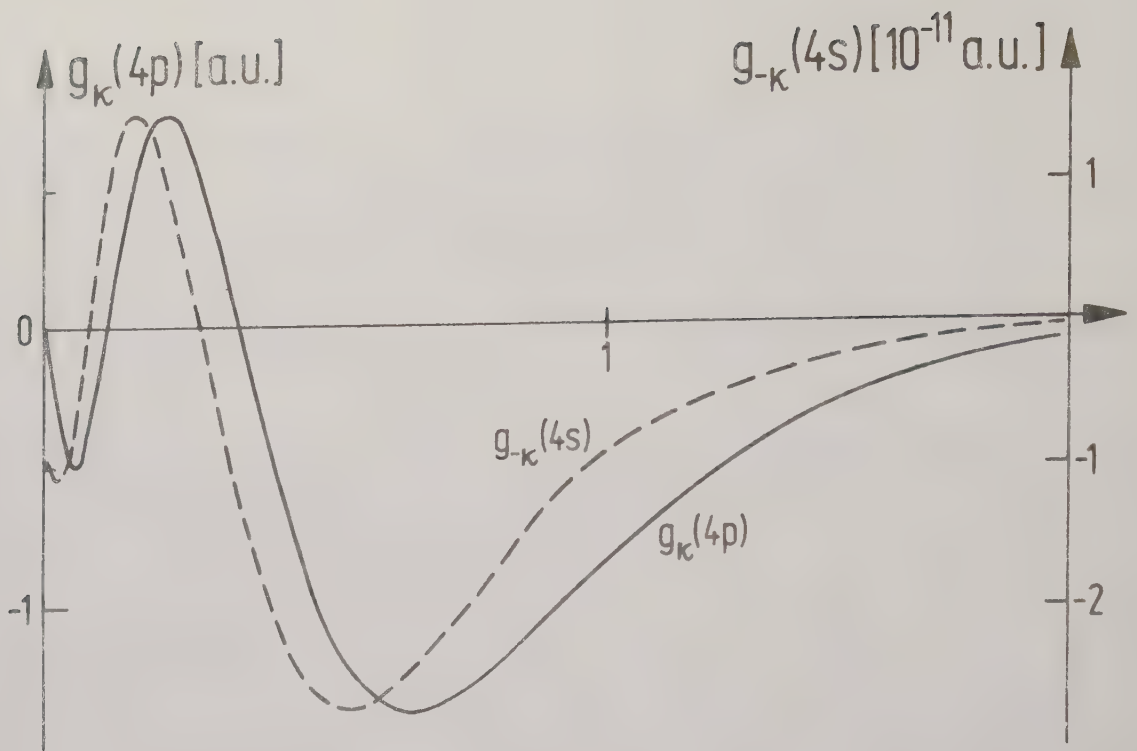


Fig.9 : Die g_{κ} - Komponente der 4s- Wellenfunktion in Hartree- Näherung und die g_{κ} - Komponente der 4p- Wellenfunktion in Hartree- Fock- Näherung.

Wie schon beschrieben, haben wir allerdings gar keine reine Hartree- Rechnung durchgeführt. Vielmehr wurden die Komponenten mit "richtiger" Parität in Hartree- Fock- Näherung und nur diejenigen "falscher" Parität in Hartree- Näherung berechnet. Als Beispiel für die hierbei erhaltenen Ergebnisse soll Figur 9 dienen.

Noch ein weiterer Punkt sei an dieser Stelle diskutiert. Wie man aus den Radialgleichungen (2.97) ersieht, ist die Stärke der Beimischung abhängig von dem Überlapp der Kerndichte mit den Komponenten "richtiger" Parität.

$$\begin{aligned}
 [E - V_{cb}(r) - V_H(r) + m] g_{-\kappa}(r) + \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\kappa}{r} \right] f_{-\kappa}(r) = \\
 = \rho(r) f_{\kappa}(r)
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

$$[E - V_{cb}(r) - V_H(r) - m] f_{-\kappa}(r) - \left[\frac{1}{2r} - \frac{\kappa}{r} \right] g_{-\kappa}(r) = \\ = p(r) g_{\kappa}(r)$$

Nun sind diese aber in der Nähe des Ursprungs proportional zu
(vergleiche (2.121) bis (2.124)) :

$$f_{\kappa}(r) \sim \begin{cases} r^{|\kappa|} & \text{für } \kappa > 0 \\ r^{|\kappa|+1} & \text{für } \kappa < 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

$$g_{\kappa}(r) \sim \begin{cases} r^{|\kappa|+1} & \text{für } \kappa > 0 \\ r^{|\kappa|} & \text{für } \kappa < 0 \end{cases}$$

Man erwartet daher, daß die Größe der $g_{-\kappa}$ - und $f_{-\kappa}$ -Komponenten sehr stark von $|\kappa|$ abhängt. Dies beobachtet man tatsächlich. In Tabelle 5 sind die Werte von $g_{-\kappa}$ und $f_{-\kappa}$ am Kernrand, d.h. in der Nähe ihres Maximums angegeben. (a.u. steht für atomare Einheiten, siehe Anhang A.)

n	κ	$ g_{-\kappa} $ in a.u.	$ f_{-\kappa} $ in a.u.
1	-1	$3.3 \cdot 10^{-9}$	$7.6 \cdot 10^{-10}$
2	-1	$1.1 \cdot 10^{-9}$	$2.7 \cdot 10^{-10}$
3	-1	$5.2 \cdot 10^{-10}$	$1.2 \cdot 10^{-10}$
4	-1	$2.4 \cdot 10^{-10}$	$5.6 \cdot 10^{-11}$
5	-1	$9.0 \cdot 10^{-11}$	$2.1 \cdot 10^{-11}$
6	-1	$2.0 \cdot 10^{-11}$	$4.8 \cdot 10^{-12}$
7	-1	$1.1 \cdot 10^{-11}$	$2.5 \cdot 10^{-12}$
2	1	$5.0 \cdot 10^{-11}$	$2.0 \cdot 10^{-10}$

3	1	$2.5 \cdot 10^{-11}$	$9.3 \cdot 10^{-11}$
4	1	$1.1 \cdot 10^{-11}$	$4.2 \cdot 10^{-11}$
5	1	$3.9 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-11}$
2	-2	$7.8 \cdot 10^{-13}$	$1.0 \cdot 10^{-13}$
3	-2	$3.7 \cdot 10^{-13}$	$4.7 \cdot 10^{-14}$
4	-2	$1.7 \cdot 10^{-13}$	$2.1 \cdot 10^{-14}$
5	-2	$5.6 \cdot 10^{-14}$	$7.1 \cdot 10^{-15}$
3	2	$2.9 \cdot 10^{-15}$	$2.0 \cdot 10^{-14}$
4	2	$1.2 \cdot 10^{-15}$	$8.7 \cdot 10^{-15}$
3	-3	$7.4 \cdot 10^{-17}$	$7.1 \cdot 10^{-18}$
4	-3	$3.2 \cdot 10^{-17}$	$3.1 \cdot 10^{-18}$

Tab.5 : Die Größe der Komponenten falscher Parität nahe des Kernrandes für die Hartree- Rechnung. (Die Hartree- Fock- Rechnung liefert die gleichen Werte, jedoch liegen die Maxima von g_{-k} und f_{-k} nicht mehr immer in der Nähe des Kernrandes; siehe Figur 10) ; n steht für die Hauptquantenzahl.

Mit diesen Wellenfunktionen kann man nun bereits einen ersten Näherungswert für das $E1_{pv}$ - Matrixelement des Übergangs $6s \rightarrow 7s$ berechnen. Wir erhalten :

$$E1_{pv}(\text{Hartree}) = -12.36 \cdot 10^{-12} \text{ iea}_0 \quad (4.4)$$

Der nächste Schritt, d.h. die Berücksichtigung des vollen Hartree-Fock- Potentials auch für die Komponenten "falscher" Parität, führt noch einmal zu einem neuen Phänomen. Um dies zu verstehen, betrachten wir das Hartree- Fock- Potential (2.160) etwas genauer.

$$\hat{V}_{HF} f_v(r) = e^2 \sum_s [s] \int dr' \left\{ \frac{1}{r'} f_s^t(r') \cdot f_s(r') \right\} f_v(r) - \quad (4.5)$$

$$- \sum_L \frac{r_L^L}{r_{>}^{L+1}} \begin{pmatrix} s & v & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \left[f_s^t(r') \cdot f_v(r') f_s(r) \pi(\ell_s + \ell_v + L) - \right. \\ \left. - f_s^t(r') \cdot \Gamma \cdot f_v(r') \Gamma \cdot f_s(r) \pi(\ell_s + \ell_v + L + 1) \right] \Bigg\}$$

Wir wollen diesen Term für die Wellenfunktion mit den Quantenzahlen $n=3$ und $\kappa=-3$ untersuchen. Wie wir aus Tabelle 5 ersehen, sind für diesen Zustand $g_{-\kappa}$ und $f_{-\kappa}$ sehr klein. Wir vernachlässigen daher alle Terme, in denen diese Radialfunktionen vorkommen.

$$\hat{V}_{HF} f_{n=3, \kappa=-3}(r) \Bigg|_{2. \text{Komponente}} \approx -e^2 \sum_s [s] .$$

$$\cdot \int \frac{r_L^L}{r_{>}^{L+1}} \begin{pmatrix} s & \frac{s}{2} & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 \cdot \left[(g_{\kappa_s}(r') g_{\kappa_v}(r') + f_{\kappa_s}(r') f_{\kappa_v}(r')) \cdot \right.$$

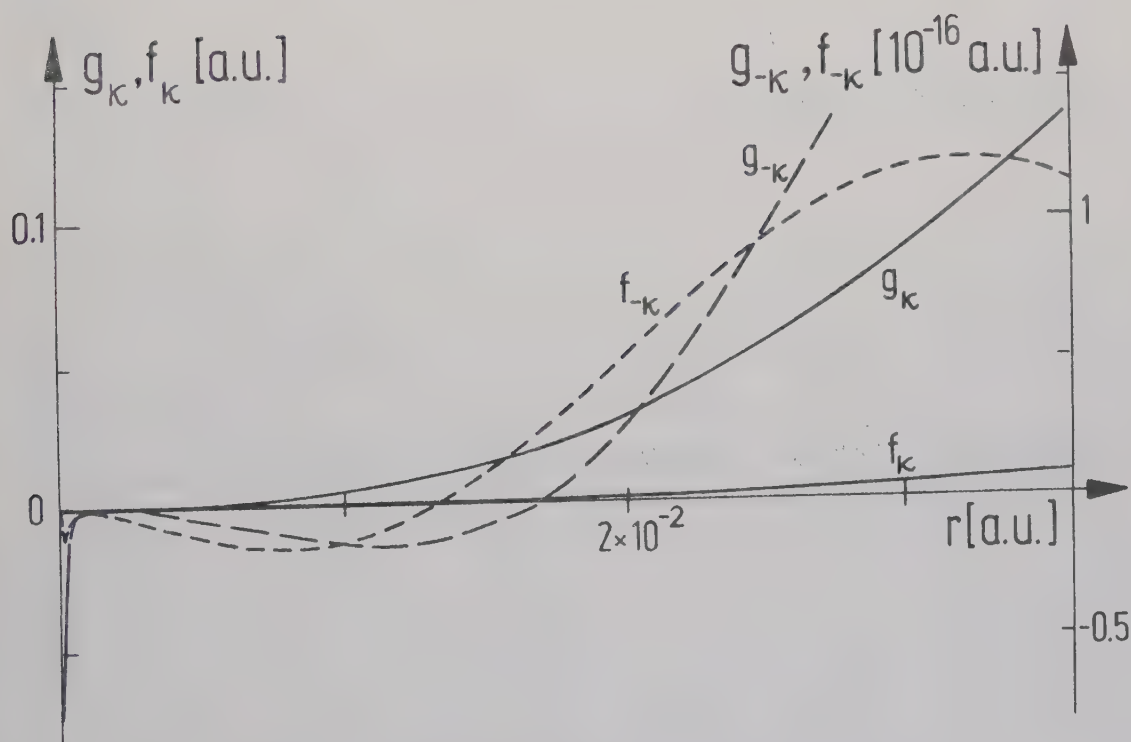
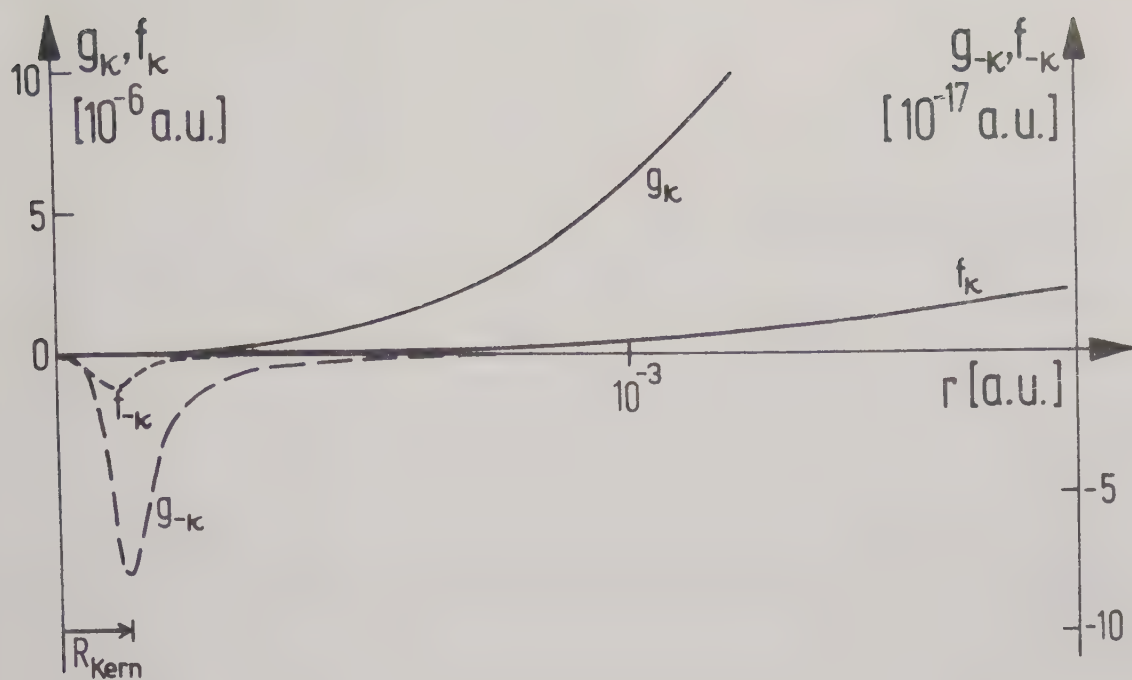
$$\cdot g_{-\kappa_s}(r') \pi(\ell_s + L) - (g_{-\kappa_s}(r') g_{\kappa_v}(r') -$$

(4.6)

$$\left. - f_{-\kappa_s}(r') f_{\kappa_v}(r') \right) g_{\kappa_s}(r) \pi(\ell_s + L + 1) \Bigg] dv'$$

Der Austauschterm des Hartree- Fock- Potentials ist in diesem Fall also so groß, daß er zumindest in bestimmten Bereichen das Verhalten der Wellenfunktionen kontrolliert. Die Paritätsmischung für den $(n=3, \kappa=-3)$ - Zustand wäre demnach nur zu einem kleinen Teil auf die P-verletzende Wechselwirkung zwischen dem $(n=3, \kappa=-3)$ - Elektron und dem

Kern, und zum größten Teil auf die Wechselwirkung mit den anderen Paritäts- gemischten Elektronenzuständen zurückzuführen. Man betrachte hierzu Figur 10. Man erkennt im obersten Teil wie die Beimischung durch den Austausch neutraler Z- Bosonen im Bereich des Kernes anwächst, aber statt nun für größere Radien auf einem insgesamt niedrigeren Niveau zu oszillieren, wie man es z.B. in Figur 9 beobachtet, wachsen die $g_{-\kappa}$ - und $f_{-\kappa}$ -Komponenten mit zunehmendem Radius stark an (mittlerer und unterer Teil von Figur 10). Außerdem sei darauf aufmerksam gemacht, daß z.B. $g_{-\kappa}$ auch außerhalb des klassischen Umkehrpunktes noch deutliche Oszillationen zeigt. Dies beweist, daß zumindest in diesem Bereich der Hartree- Fock- Term (4.6) die Dirac- Gleichung dominiert. (Die anderen Terme liefern in diesem Bereich grundsätzlich einen exponentiellen Abfall.)



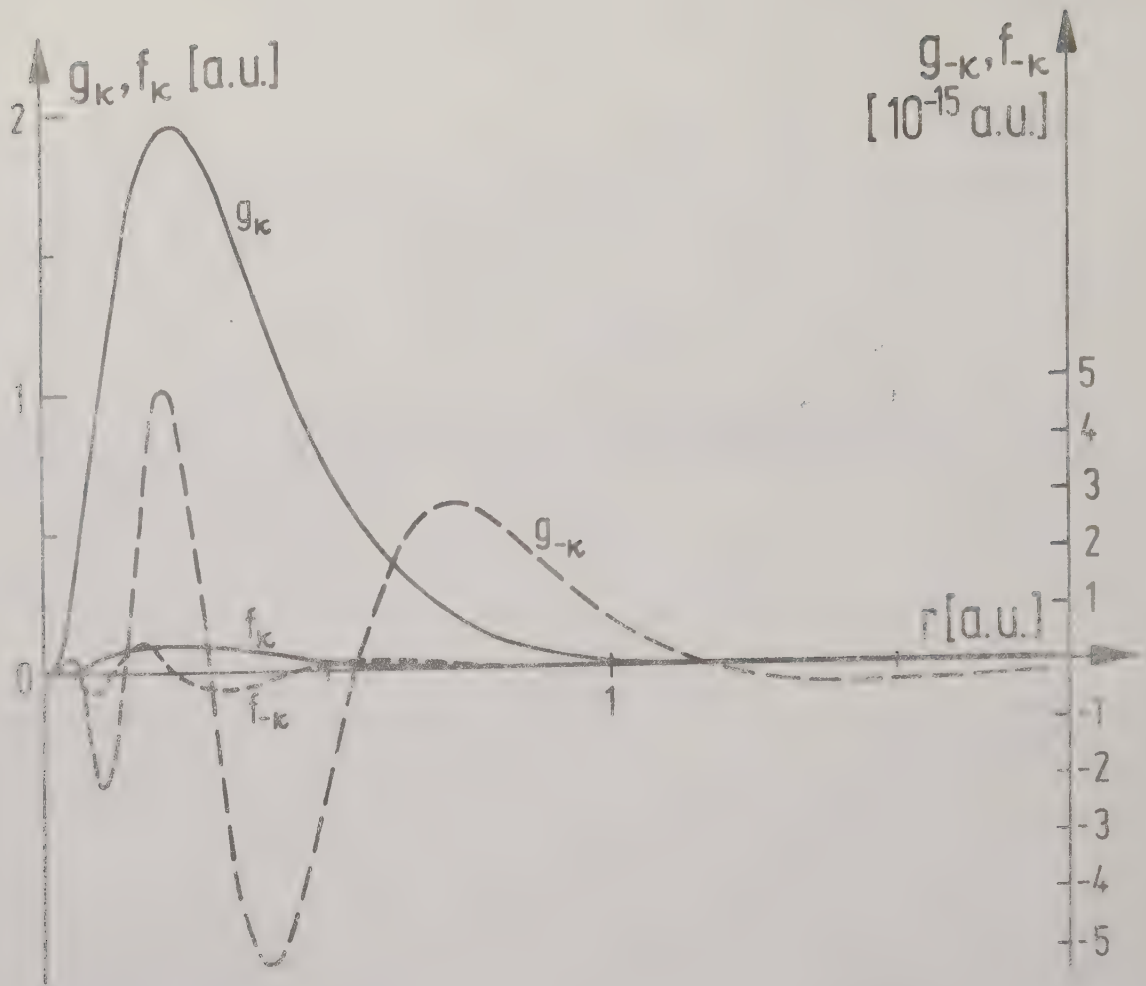


Fig.10 : Die HF- Wellenfunktion des $(n=3, \kappa=-3)$ -Zustandes

In Figur 11 ist die $1s$ - Wellenfunktion dargestellt. Wie bereits besprochen wurde, dominiert hier ein einfacher exponentieller Abfall ab dem Kernrand das Verhalten der Komponenten "falscher" Parität. Aufgrund des HF- Austauschtermes tritt auch hier ein nochmaliges leichtes Ansteigen und Oszillieren dieser Komponenten ab $r \approx 10^{-1}$ a.u. auf, die jedoch in Figur 11 nicht mehr zu erkennen sind.

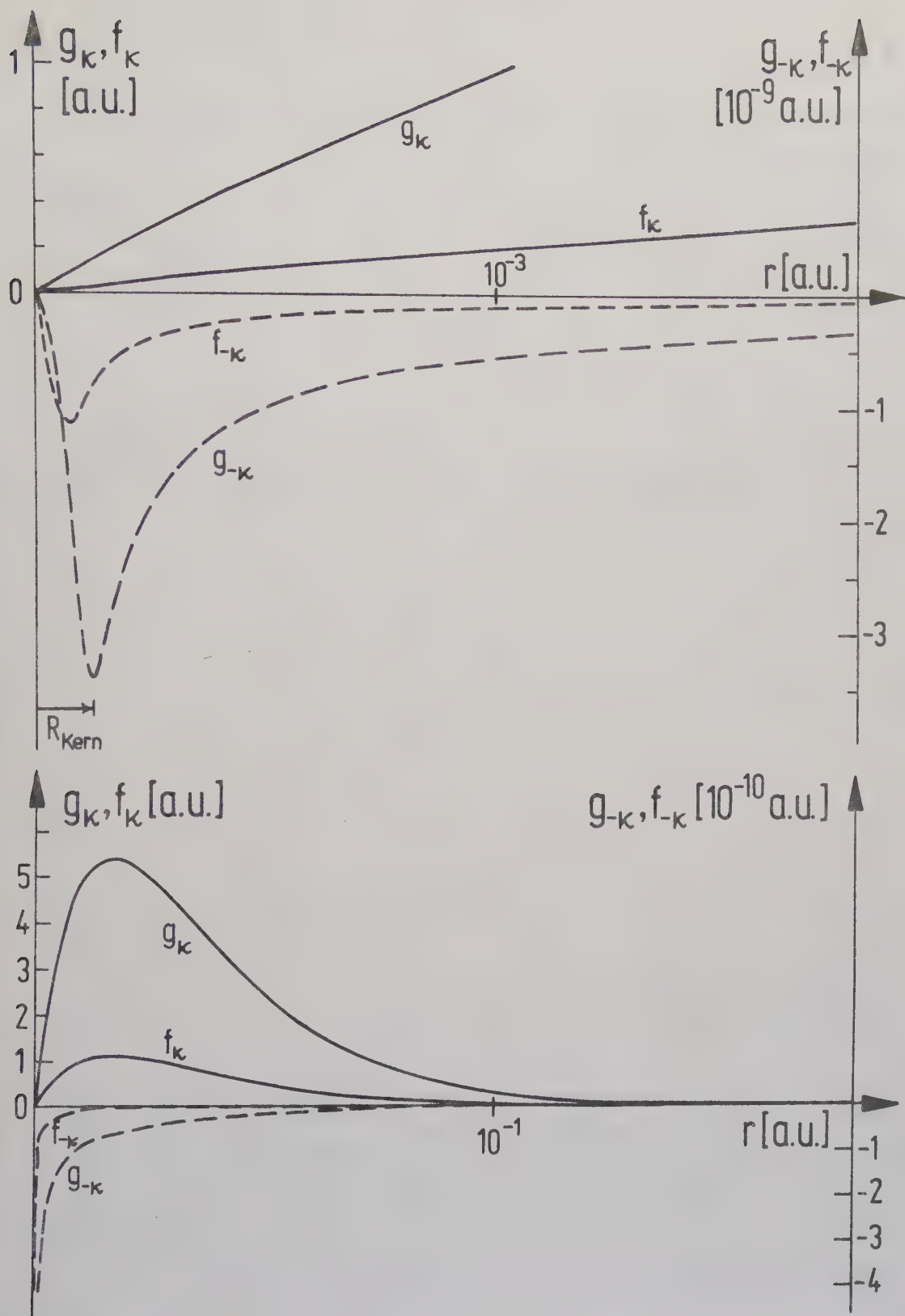
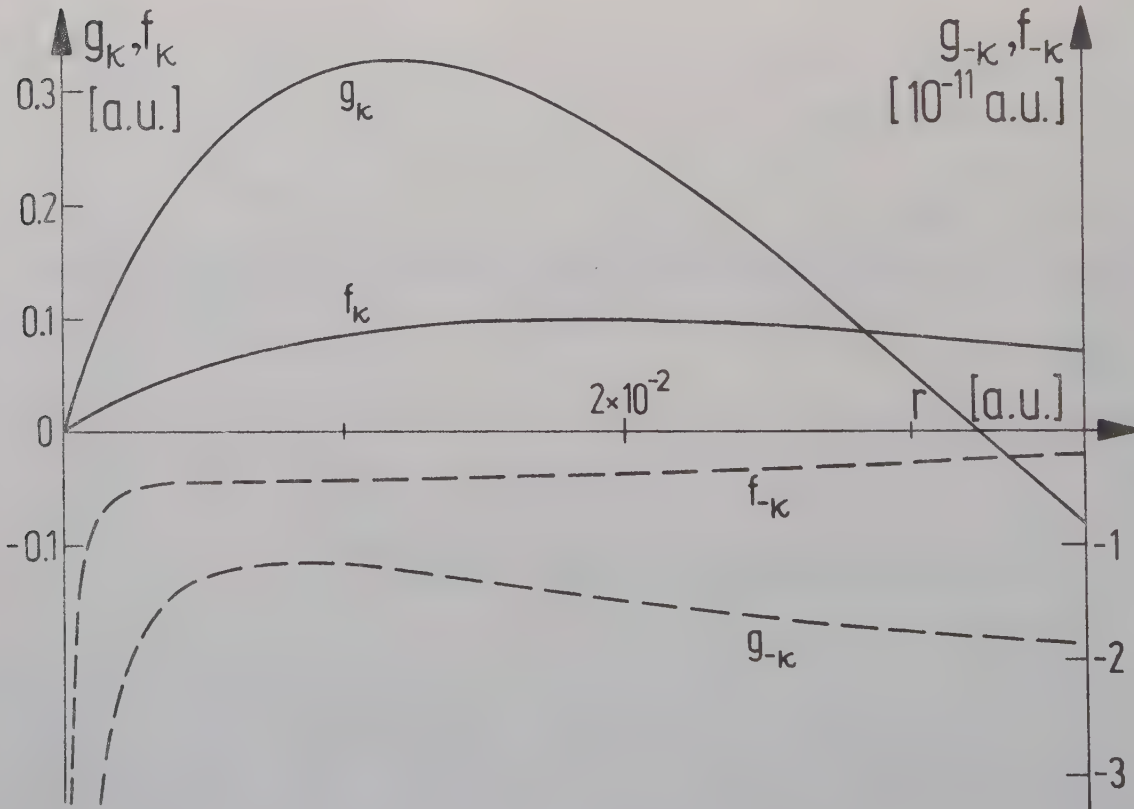
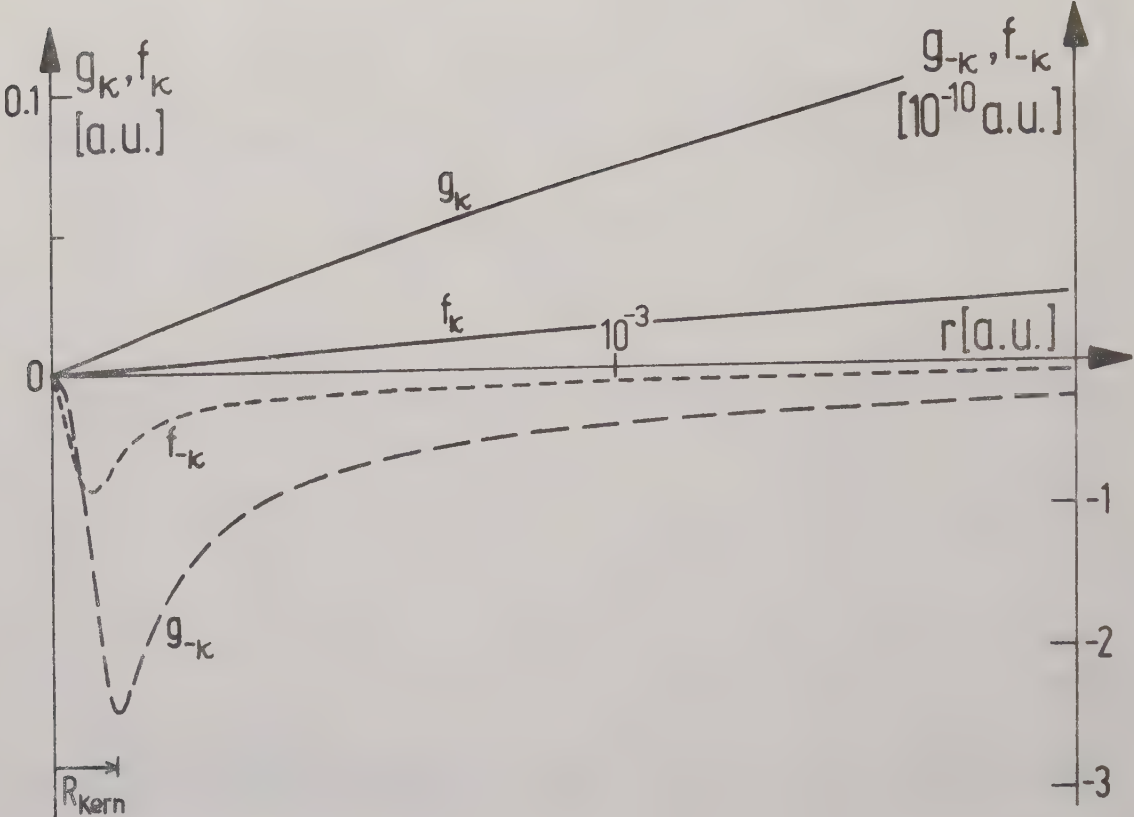


Fig.11 : Die HF- Wellenfunktion des 1s-Zustandes

Schließlich sind in Figur 12 noch die 4s- Wellenfunktionen dargestellt.



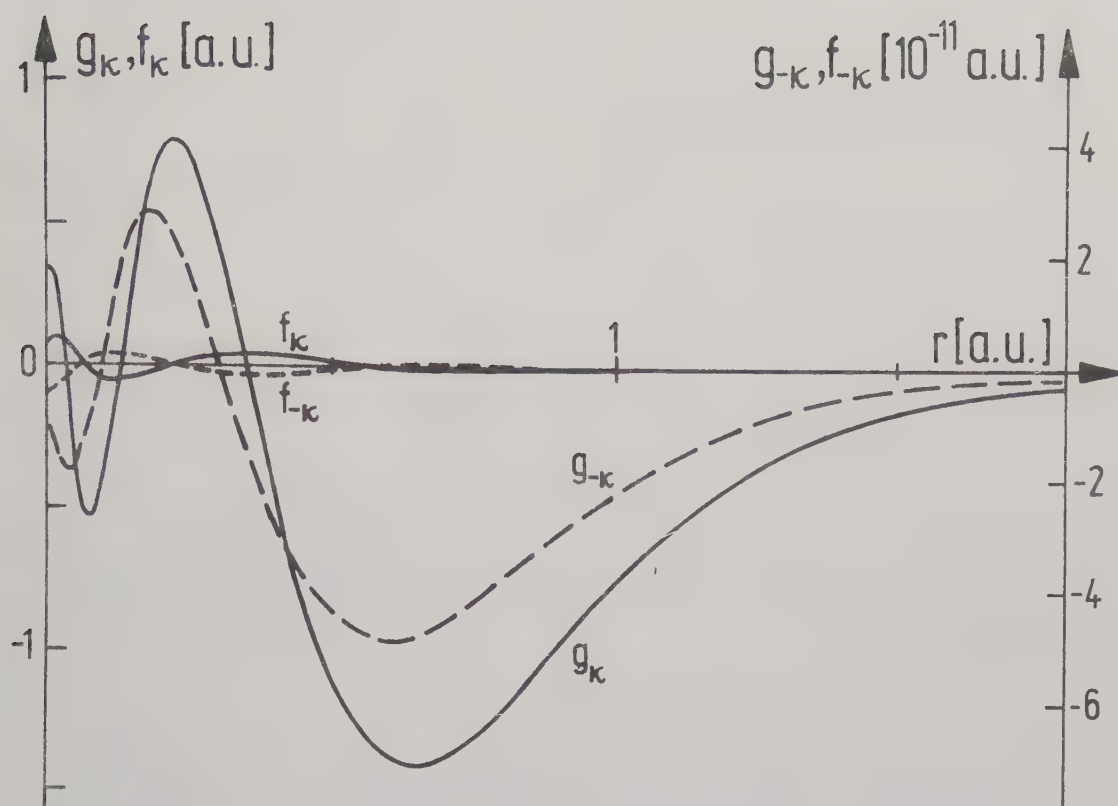


Fig.12 : Die HF- Wellenfunktion des 4s-Zustandes

Diese Figur wurde insbesondere deshalb aufgenommen, weil sie besonders klar zeigt, wie sich mit zunehmendem Radius die durch die Elektron- Kern- Wechselwirkung aufgebauten Komponenten g_{-k} und f_{-k} sich außerhalb des Bereiches dieser Wechselwirkung aufeinander einstellen und von da an das übliche oszillierende Verhalten zeigen. Mit den so erhaltenen HF- Wellenfunktionen berechnet sich der Wert von $E1_{pv}$ zu :

$$E1_{pv}(\text{Hartree-Fock}) = -8.4 \cdot 10^{-12} \text{ iea}_0 \quad (4.7)$$

Die Berücksichtigung der paritätsverletzenden Elektron- Elektron- Wechselwirkung (siehe Abschnitt II.3.2) ändert dieses Ergebnis nicht merklich. Ihr Beitrag zu $E1_{pv}$ ist ungefähr :

$$\Delta E1_{pv}(\text{e-e-Wechselwirkung}) \approx 0.04 \cdot 10^{-12} \text{ iea}_0 \quad (4.8)$$

Den Wert (4.7) gilt es nun mit den experimentellen Ergebnissen (Bou82,Bou84a)

$$E1_{pv}(\text{Exp.1}) = -7.1 \pm 1.3 \cdot 10^{-12} \text{ iea}_0 \quad (4.9)$$

$$E1_{pv}(\text{Exp.2}) = -9.4 \pm 1.5 \cdot 10^{-12} \text{ iea}_0$$

zu vergleichen.

Bei unseren Rechnungen hatten wir einen festen Wert für $\sin^2 \theta_w$ verwendet (Wh81) :

$$\sin^2 \theta_w = 0.22 \quad (4.10)$$

Da das Ergebnis gemäß Gleichung (2.82) mit

$$\frac{1}{4} \left(1 - 4 \sin^2 \theta_w - \frac{N}{Z} \right) = \sin^2 \theta_w - 0.105 \quad (4.11)$$

skaliert, ist es jedoch leicht das berechnete $E1_{pv}$ -Matrixelement als Funktion von $\sin^2 \theta_w$ anzugeben. In Figur 13 ist diese Vorhersage mit dem Ergebnis der Experimenten (4.9) verglichen. Offensichtlich ist unser Ergebnis mit den experimentellen Resultaten gut verträglich. Hierdurch wird das GSW- Model auch für niedrige Energien bestätigt (vergleichen Sie Figur 1 auf Seite 23). Die erreichte experimentelle Genauigkeit ist allerdings eher schlechter als in den Hochenergie- Experimenten. Die ursprüngliche Hoffnung, in atomphysikalischen Experimenten eine deutlich höhere Genauigkeit zu erzielen, hat sich somit bisher nicht erfüllt .

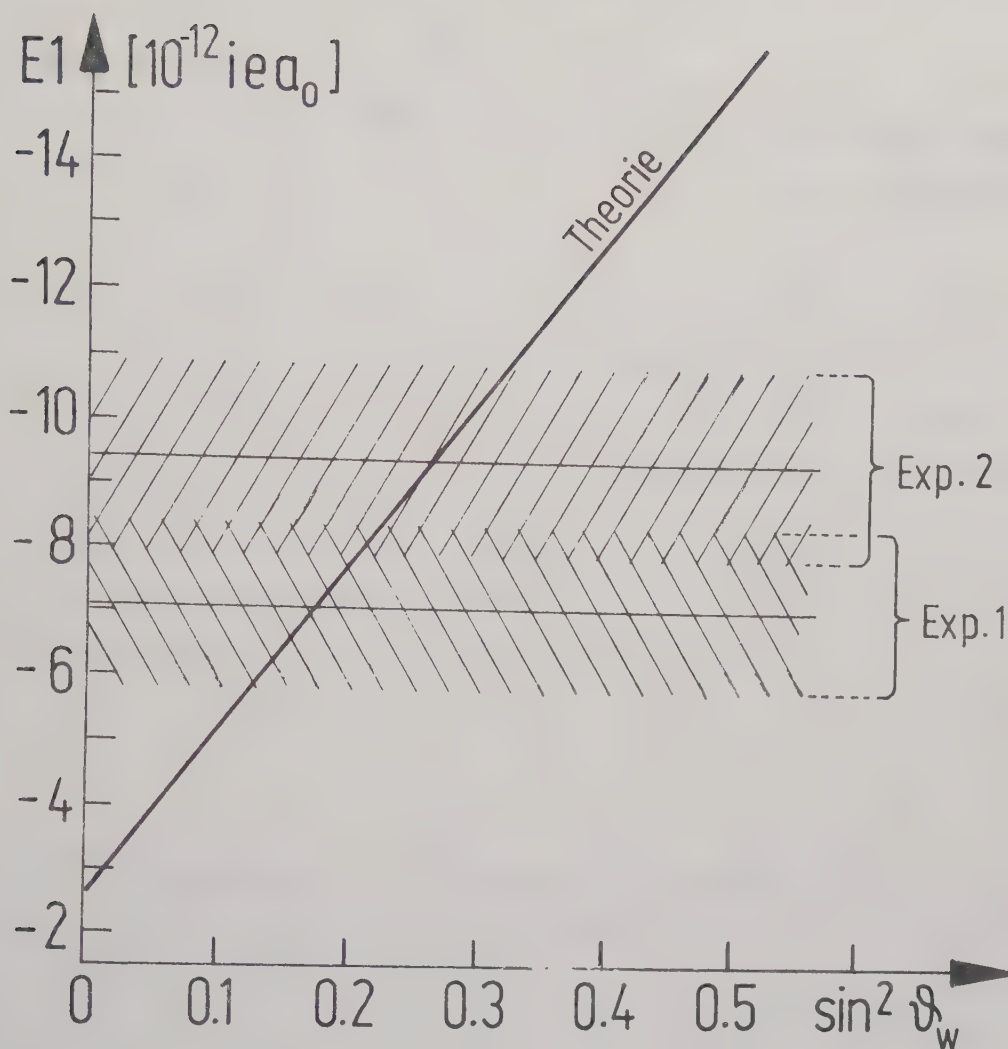


Fig.13 : Vergleich unserer Ergebnisse mit den Experimenten

Als diese Arbeit begonnen wurde, streuten die Vorhersagen für $E1_{pv}$ noch über einen sehr weiten Bereich (No73, Lo75, Ne77, Da81). Inzwischen wurden neben unserer noch eine ganze Reihe anderer Rechnungen durchgeführt, die jedoch noch nicht alle publiziert wurden (BP83, Dz84, Ma84, Jo85). Die Ergebnisse dieser Rechnungen liegen im Bereich

$$E1_{pv} = - (8.1 - 8.5) 10^{-12} iea_0 \quad (4.12)$$

in Übereinstimmung mit unserem Ergebnis und den Experimenten.

Schließlich wollen wir anmerken, daß die Möglichkeit, erweiterte Dirac- Hartree- Fock- Gleichungen zu lösen, um die Effekte der P- Verletzung in Atomen zu berechnen, wohl zuerst von P.G.H.Sandars besprochen wurde (Sa77). (Wir haben von dieser Arbeit allerdings erst nachträglich erfahren.)

V. STARKE CP-VERLETZUNG IM MIT- BAG- MODELL

Wir haben dieses Beispiel aus zwei Gründen in diese Arbeit aufgenommen. Zum einen um zu zeigen, welche große Vielfalt von Problemen man mit der vorgestellten Methode behandeln kann, und zum anderen, weil sich dieses Problem auch analytisch lösen läßt, was einen Test der numerischen Rechnung ermöglicht.

Dieses Beispiel läßt sich letztlich auf die Aufgabe reduzieren, die folgende Dirac- Gleichung zu lösen :

$$[-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m + i \beta \gamma_5 g] \psi = E \psi \quad (5.1)$$

$$\vec{e}_r \cdot \vec{\gamma} \psi = \psi \quad \text{für } |\vec{r}| = R$$

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden wir den feldtheoretischen Hintergrund dieser Gleichung erläutern. Im zweiten Abschnitt beschreiben wir dann, wie man diese Gleichung in Analogie zur Paritätsverletzung in der Atomphysik löst. Das erhaltene Ergebnis vergleichen wir dann mit dem analytischen Resultat. Aufgrund der besonders einfachen Struktur des Symmetrie- verletzenden Terms in (5.1) sind die einzelnen Schritte des Lösungsverfahrens recht übersichtlich, so daß dieses Beispiel einen einfachen Zugang zum Verständnis der verwendeten Techniken bietet. Darüber hinaus hat das Ergebnis auch physikalische Bedeutung. Als Resultat werden wir eine Ausdruck erhalten, der das elektrische Dipolmoment des Neutrons als Funktion der Stärke der CP- Verletzung angibt. Hieraus folgt dann eine obere Schranke für den sogenannten θ - Parameter. Es wird sich zeigen, daß unser Ergebnis etwas von dem früherer Rechnungen abweicht.

V.1. DER FELDTHEORETISCHE HINTERGRUND

In diesem Abschnitt soll die Bedeutung von Gleichung (5.1) skizziert werden. Eine vollständige Darstellung würde auch in diesem Fall den Rahmen der vorgelegten Arbeit sprengen. Daher sei für eine genauere Beschreibung auf die Lehrbücher der Quantenfeldtheorie verwiesen, z.B. auf (IZ80) oder (Hu82).

Ähnlich wie die Gruppe der Lorentz- Transformationen in mehrere Teile zerfällt, nämlich in $L^{\uparrow}_{+}$, $L^{\uparrow}_{-}$, $L^{\downarrow}_{+}$ und $L^{\downarrow}_{-}$ (vergleiche Abschnitt II.1), besteht auch die Gruppe der lokalen SU(2)- Transformationen aus mehreren Komponenten. Zwei Transformationen aus der gleichen Komponente lassen sich dabei kontinuierlich ineinander überführen, während dies für zwei Transformationen aus unterschiedlichen Komponenten unmöglich ist. Dies wird am deutlichsten, wenn man zur sogenannten "euklidischen Zeit" übergeht, d.h. durch analytische Fortsetzung x^0 durch ix^0 ersetzt. Dann ist es nämlich möglich eine Größe "n" zu definieren, die eine stetige Funktion der Eichparameter ist und für jede Komponente der SU(2)- Transformationen einen unterschiedlichen diskreten Wert annimmt. Diese Größe bezeichnet man als "topologische Quantenzahl". Die genaue Definition läßt sich folgendermaßen formulieren.

Sei U eine SU(2)- Eichtransformation .

Sei weiterhin

$$\lambda^k(x) = U(x) \delta^k U(x) \quad k = 1, 2, 3 \quad (5.2)$$

So ist die zu U gehörende topologische Quantenzahl

$$n[U] = \frac{1}{24\pi^2} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{S_R^3} dS \epsilon^{ijk} \operatorname{Sp} \{ \lambda^i(x) \lambda^j(x) \lambda^k(x) \} \quad (5.3)$$

Hierbei ist S_R^3 die Oberfläche einer vierdimensionalen Kugel mit dem Radius "R".

$$S_R^3 := \{ x_\mu \mid (x_0)^2 + (x_1)^2 + (x_2)^2 + (x_3)^2 = R^2 \} \quad (5.4)$$

Es läßt sich zeigen, daß die so definierte Größe "n" immer eine ganze Zahl ist. Da sie stetig von den Eichparametern abhängt, kann es daher keinen kontinuierlichen Übergang zwischen Eichungen mit unterschiedlichem "n" geben. (Diese Argumentation ist völlig analog zu der in Abschnitt II.1.1 vorgestellten.) Wir wollen noch ein weiteres Resultat zitieren, daß die sorgfältige mathematische Analyse liefert: Werden mehrere Eichtransformationen hintereinander ausgeführt, so addieren sich die topologischen Quantenzahlen:

$$U(x) = U_1(x) + U_2(x) \\ n[U(x)] = n[U_1(x)] + n[U_2(x)] \quad (5.5)$$

Nach dem bisher Gesagten sollte einsichtig sein, daß man nicht entscheiden kann, welche topologische Quantenzahl der Vakuumzustand des Yang-Mills-Feldes hat, da diese ja von der Wahl der Eichung abhängt und daher keine physikalische Bedeutung besitzt. Somit muß man den physikalischen Vakuumzustand $|\text{vac}\rangle$ als Überlagerung von Vakuumzuständen mit verschiedener topologischer Quantenzahl betrachten. Dies läßt sich am übersichtlichsten darstellen, wenn man eine speziell gewählte Menge von Eichtransformationen mit unterschiedlichen topologischen Quantenzahlen betrachtet. Wir wählen:

$$U(x) = \frac{1}{r} (x + \vec{x} \cdot \vec{e}) ; \quad r^2 = x_0^2 + (\vec{x})^2 \quad (5.6)$$

$$U_m(x) = [U(x)]^m \quad m \in \mathbb{Z} \quad (5.7)$$

mit den folgenden angenehmen Eigenschaften :

$$U_m(x) \cdot U_{m'}(x) = U_{m+m'}(x) \quad (5.8)$$

$$n[U_m(x)] = m \quad (5.9)$$

Die Eichtransformation U_m ist also ein Vertreter der Gruppen- Komponente mit $n=m$, und zu jeder Komponente gehört ein Element U_m .

Mit diesen Eichtransformationen lassen sich nun nach Vorgabe eines speziellen Vakuumzustandes $|0\rangle_0$ eine ganze Klasse anderer Vakuumzustände $|0\rangle_n$ definieren.

$$|0\rangle \text{ festgelegt durch Eichfixierung} \quad (5.10)$$

$$|0\rangle_n := U_n(x) |0\rangle_0 \quad (5.11)$$

Auf diese Weise hat man die Eichung in jedem dieser Vakuumzustände $|0\rangle_n$ (genannt θ -Vakua) festgelegt. Der physikalische Vakuumzustand ist nun diejenige Überlagerung der θ - Vakua, die unter den Eichtransformationen $U_m(x)$ bis auf eine Phase invariant sind.

$$|vac\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n |0\rangle_n \quad (5.12)$$

$$U_m(x) |vac\rangle = e^{im\theta} |vac\rangle \quad (5.13)$$

Aus (5.13) folgt dann :

$$|vac\rangle = \text{const.} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |0\rangle_n \quad (5.14)$$

Der Parameter θ ist a priori unbekannt. Es wird sich zeigen, daß man ihn sehr klein wählen muß, z.B. $\theta < 10^{-8}$, um nicht in Widerspruch zu experimentellen Befunden zu kommen. Diese Kleinheit von θ legt es nahe zu überlegen, ob es vielleicht ein tieferes Prinzip gibt, daß $\theta=0$ er-

zwingt. Ein Versuch in diese Richtung stellen die Axionen- Modelle dar (PQ77,Di81). Für die phänomenologische Bedeutung des θ - Parameters ist entscheidend, das der Vakuum- Zustand (5.14) komplex ist. Dies kann zu einer Verletzung der Zeitumkehrinvarianz führen, da der T- Operator eine komplexen Konjugation enthält. Da die SU(2) eine Untergruppe der SU(3) ist, läßt sich die gesamte vorgestellte Analyse auf die Farb- SU(3) übertragen. Dies führt zu der bemerkenswerten Aussage:

Falls $\theta_{\text{QCD}} \neq 0$ ist, kann die Farbwechselwirkung die T=CP - Invarianz verletzen. (5.15)

Bei der weiteren Untersuchung des Problems der QCD- θ - Vakua kam nun folgende interessante Frage auf : Ist es eventuell möglich, die Phasenfaktoren, die in Gleichung (5.14) auftreten durch eine Umdefinition der physikalischen Felder zum Verschwinden bringen? Tatsächlich ist dies bei Anwesenheit von Fermionenfeldern möglich, indem man mindestens eines der Felder gemäß

$$\psi(x) \longrightarrow e^{-i\alpha \gamma_5} \psi(x) \quad (5.16)$$

transformiert und α entsprechend wählt. (Im Grunde handelt es sich hierbei um einen mathematischen Trick im Rahmen der Beschreibung durch Feld- Funktionalintegrale.) Gleichung (5.16) ist aber nur dann eine Symmetrietransformation der Lagrangedichte, wenn das transformierte Fermionenfeld masselos ist. Dies bedeutet, daß, wenn mindestens eines der farbigen Fermionen, d.h. der Quarks, masselos ist, keine starke CP- Verletzung auftritt. Sind dagegen alle Quarks massiv, und dessen ist man sich heute ziemlich sicher, so ist die Lagrangedichte gegenüber (5.16) nicht invariant. Die Transformation führt zwar auch in diesem Fall zum Verschwinden des θ_{QCD} - Terms, erzeugt aber gleichzeitig einen neuen CP- verletzenden Term :

$$\begin{aligned}
 m \bar{\psi} \psi &= m \psi^\dagger \gamma_0 \psi \longrightarrow m \psi^\dagger e^{i\alpha\gamma_5} \gamma_0 e^{-i\alpha\gamma_5} \psi = \\
 &= m \psi^\dagger \gamma_0 e^{-i\alpha\gamma_5} e^{-i\alpha\gamma_5} \psi = m \bar{\psi} e^{-2i\alpha\gamma_5} \psi = \\
 &= \bar{\psi} (m' + i q \gamma_5) \psi
 \end{aligned}$$

$$m' = m \cdot \cos(2\alpha) \approx m \quad q = -m \sin(2\alpha) \approx -2m\alpha \quad (5.17)$$

Man kann die Folgen der Existenz der verschiedenen θ - Vakua daher auch dadurch studieren, daß man die Konsequenz des Zusatzterms $i\beta\gamma_5 q$ in der Lagrangedichte diskutiert. Bei Vorhandensein mehrerer Quarks tritt anstelle von m eine im allgemeinen nicht diagonale Massenmatrix. Die Analyse für diesen allgemeinen Fall zeigt (Ba79), daß die modifizierten Dirac- Gleichungen der Quarks lauten

$$[-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta (m + i q \gamma_5)] \psi = E \psi \quad (5.18)$$

Wobei sich q aus dem θ - Parameter gemäß

$$q = \frac{\theta}{\frac{1}{m_u} + \frac{1}{m_d} + \frac{1}{m_s} + \frac{1}{m_c} + \dots} \quad (5.19)$$

bestimmt. Dies ist gerade unsere Gleichung (5.1). Man erkennt auch hier wieder, daß falls eine der Quarkmassen verschwindet das starke CP- Problem vermieden wird.

V.2 DIE BAG-WELLENFUNKTIONEN

In diesem Abschnitt wollen wir die MIT- Bag- Wellenfunktionen der Quarks unter Berücksichtigung der starken CP- Verletzung berechnen. Wir wollen also die Dirac- Gleichung (5.1) mit der Randbedingung

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$$

$$\left[\psi_1(x) = -i \sigma_v \psi_2(x) \right]_{\text{für } |\vec{x}|=1} \quad (5.20)$$

lösen. Hierbei haben wir (wie im folgenden überhaupt) den Bagradius gleich Eins gesetzt.

Als erstes untersuchen wir, welche der diskreten Symmetrien durch den Zusatzterm $i\beta\gamma_5 q$ verletzt wird. Hierzu untersuchen wir, wie sich dieser Term bei Vertauschung mit den entsprechenden Symmetrie-Operatoren verhält (siehe die Diskussion am Ende von Abschnitt II.1.2). Wir erhalten die folgenden Resultate :

Die P-Invarianz ist verletzt.

$$\gamma_0 \cdot i\beta\gamma_5 q \cdot \gamma_0 = -i\beta\gamma_5 q \neq i\beta\gamma_5 q \quad (5.21)$$

Die T-Invarianz ist verletzt.

$$i\gamma^1\gamma^3 [i\beta\gamma_5 q \cdot (-i\gamma^1\gamma^3)]^* = i\gamma^1\gamma^3 \beta\gamma_5\gamma^1\gamma^3 q =$$

$$= -i q \gamma^1 \beta \gamma_5 \gamma^1 = -i q \beta \gamma_5 \neq i\beta\gamma_5 q \quad (5.22)$$

Die C-Invarianz ist erhalten.

$$PT \cdot [i\beta\gamma_5 q] \cdot (PT)^{-1} = i\beta\gamma_5 q \quad (5.23)$$

Außerdem gilt es zu zeigen, daß dieser Ausdruck mit dem Drehimpulsoperator (2.32) vertauscht.

$$[\hat{J}, i\beta \gamma_5 q] = \frac{i}{2} q \left[\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = 0 \quad (5.24)$$

Der uns interessierende Zusatzterm ist somit radialsymmetrisch und verletzt sowohl die P- als auch die T- Invarianz, erhält aber die C- Symmetrie. Die allgemeine Analyse in Abschnitt II.1.2 erlaubt es uns nun unmittelbar die allgemeine Form der Lösung anzugeben (siehe Gleichung (2.51)).

$$\psi(x) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) + g_{-\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) \\ i f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu}(\Omega) + i f_{-\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

In Abschnitt II.6 wurde bereits gezeigt, daß dieser Ansatz im Gegensatz zum Ansatz bei erhaltener T- Symmetrie (Gleichung (2.86)) das Auftreten eines elektrischen Dipolmoments gestattet.

$$\langle \psi(\kappa=-1) | r \cos \vartheta | \psi(\kappa=-1) \rangle \sim$$

$$\sim \int dr \cdot r (g_{-1}(r) g_1(r) + f_{-1}(r) f_1(r))$$

Wir setzen diesen Ansatz in die Dirac- Gleichung ein und erhalten in der gewohnten Weise die folgenden gekoppelten Differentialgleichungen für die Radialfunktionen.

$$\frac{\partial}{\partial r} g_{\kappa} = -\frac{\kappa}{r} g_{\kappa} - \gamma g_{-\kappa} + (E+m) f_{\kappa}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} g_{-\kappa} = \frac{\kappa}{r} g_{-\kappa} - \gamma g_{\kappa} + (E+m) f_{-\kappa}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} f_{\kappa} = \frac{\kappa}{r} f_{\kappa} + \gamma f_{-\kappa} - (E-m) g_{\kappa} \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} f_{-\kappa} = -\frac{\kappa}{r} f_{-\kappa} + \gamma f_{\kappa} - (E-m) g_{-\kappa}$$

Diese Gleichung wird numerisch vom Ursprung bis zum Bagrand integriert. Im Unterschied zur zwei-komponentigen Dirac-Gleichung ohne Zusatzterm gibt es aber nun nicht nur eine Lösung die am Ursprung bzw. am Rand regulär ist, sondern zwei: I^1, I^2 bzw. A^1, A^2 (und alle Linearkombinationen). Für die asymptotische Innen- bzw. Außenlösung gilt also (r_{in} ist der Wert, bei dem man zu integrieren beginnt.):

$$f_{in} = \begin{pmatrix} g_{\kappa} \\ g_{-\kappa} \\ f_{\kappa} \\ f_{-\kappa} \end{pmatrix}_{r=r_{in}} = \alpha \cdot I^1 + \beta \cdot I^2 \quad (5.27)$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ reell

$$f_{au\beta en} = \begin{pmatrix} g_{\kappa} \\ g_{-\kappa} \\ f_{\kappa} \\ f_{-\kappa} \end{pmatrix}_{r=1} = \gamma \cdot A^1 + \delta \cdot A^2 \quad (5.28)$$

Es gilt nun die fünf Größen $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ und E so zu wählen, daß der Mißmatch in den vier Radialfunktionen verschwindet und daß die Gesamtwellenfunktion normiert ist. Mit diesen fünf Bedingungen kann man die fünf Unbekannten eindeutig bestimmen.

Aus der Randbedingung (5.20) folgt

$$\begin{aligned}
 g_{\kappa}(r=1) &= -f_{\kappa}(r=1) \\
 g_{-\kappa}(r=1) &= -f_{-\kappa}(r=1)
 \end{aligned}
 \tag{5.29}$$

so daß man für die Vektoren A^1 und A^2 einfach

$$A^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}
 \tag{5.30}$$

wählen kann. Die Bestimmung von I^1 und I^2 ist etwas aufwendiger. Hierzu entwickelt man die Radialfunktionen in eine Taylorreihe.

$$f = \begin{pmatrix} g_{\kappa} \\ g_{-\kappa} \\ f_{\kappa} \\ f_{-\kappa} \end{pmatrix} = r^{|\kappa|} \begin{pmatrix} a_0 + a_1 r + \dots \\ b_0 + b_1 r + \dots \\ c_0 + c_1 r + \dots \\ d_0 + d_1 r + \dots \end{pmatrix}
 \tag{5.31}$$

Setzt man diese Entwicklung in (5.26) ein, so ergibt sich in niedrigster Ordnung

$$\begin{aligned}
 \kappa > 0 &\Rightarrow a_0, d_0 = 0 & b_0, c_0 \text{ beliebig} \\
 \kappa < 0 &\Rightarrow b_0, c_0 = 0 & a_0, d_0 \text{ beliebig}
 \end{aligned}
 \tag{5.32}$$

und aus der Analyse der höheren Ordnungen die Rekursionsbeziehung

$$\begin{aligned}
 a_j &= (-q b_{j-1} + (E+m) c_{j-1}) / (|\kappa| + \kappa + j) \\
 b_j &= (-q a_{j-1} + (E+m) d_{j-1}) / (|\kappa| - \kappa + j) \\
 c_j &= (q d_{j-1} - (E-m) a_{j-1}) / (|\kappa| - \kappa + j) \\
 d_j &= (q c_{j-1} - (E-m) b_{j-1}) / (|\kappa| + \kappa + j)
 \end{aligned}
 \tag{5.33}$$

$j = 1, 2, \dots$

Um (5.32) zu gewährleisten wählen wir :

$$\text{1. Lösung} \quad a_0 = \sqrt{|\kappa| - \kappa} \quad ; \quad c_0 = -\sqrt{|\kappa| + \kappa} \quad ; \quad b_0, d_0 = 0$$

$$\xrightarrow{(5.33)} I^1$$

$$\text{2. Lösung} \quad a_0, c_0 = 0 \quad ; \quad b_0 = \sqrt{|\kappa| + \kappa} \quad ; \quad d_0 = \sqrt{|\kappa| - \kappa}$$

$$\xrightarrow{(5.33)} I^2$$

(5.34)

wobei wir alle Terme in der Potenzreihe bis zur Ordnung r^3 mitnehmen. Die numerische Lösung von (5.26) ist völlig analog zum Vorgehen für die Paritäts- verletzenden Radialgleichungen in Hartree- Näherung (Kapitel III). Man integriert die beiden Innenlösungen I^1 und I^2 bis zum Bagrand und bestimmt diejenige Linearkombination der I^1 und I^2 einerseits und der A^1 und A^2 andererseits, für die der Mißmatch minimal wird. Aus dem verbleibenden Mißmatch bestimmt man dann die Energiekorrektur.

Dieses Beispiel hat nun den großen Vorteil, daß sich für kleine Werte von q die Lösung auch näherungsweise analytisch angeben läßt, so daß sich an diesem Problem die von uns verwendete Methode testen läßt. Darüber hinaus erlaubt die vorgestellte numerische Methode natürlich auch die Behandlung anderer CP- verletzender Zusatzterme, für die eine analytische Lösung nicht angegeben werden kann.

Sei

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

(5.35)

eine Lösung der Bag- Dirac- Gleichung ohne Zusatzterm :

$$(\hat{H} - E) \psi = 0 \quad ; \quad \psi_1(r=1) = -i \sigma_r \psi_2(r=1) \quad (5.36)$$

so ist auch

$$\tilde{\psi} = i\beta\gamma_5 \psi = \begin{pmatrix} -i\psi_2 \\ i\psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

eine Lösung, allerdings mit negativer Energie.

$$(\hat{H} + E) \tilde{\psi} = (\hat{H} + E) i\beta\gamma_5 \psi = i\beta\gamma_5 (-\hat{H} + E) \psi = 0$$

$$\begin{aligned} [\tilde{\psi}_1 + i\sigma_r \tilde{\psi}_2]_{r=1} &= [-i\psi_2 - \sigma_r \psi_1]_{r=1} = \\ &= -\sigma_r [i\sigma_r \psi_2 + \psi_1]_{r=1} = 0 \end{aligned} \quad (5.38)$$

Gleichung (5.1) wird dann näherungsweise durch

$$\psi' = \psi + \varepsilon \tilde{\psi} \quad ; \quad \varepsilon = \frac{q}{2E} \quad (5.39)$$

gelöst :

$$\begin{aligned} [\hat{H} - E + i\beta\gamma_5 q] (\psi + \varepsilon \tilde{\psi}) &= \\ &= i\beta\gamma_5 q \psi + \varepsilon (-2E + i\beta\gamma_5 q) \tilde{\psi} = \\ &= i\beta\gamma_5 q \psi - \varepsilon \cdot 2E i\beta\gamma_5 \psi + i\beta\gamma_5 \frac{q^2}{2E} i\beta\gamma_5 \psi = \\ &= 0 + O(q^2) \end{aligned} \quad (5.40)$$

Da die Lösungen des MIT- Bagmodells bekannt sind (Th82), läßt sich die CP- verletzende Wellenfunktion unmittelbar angeben.

$$\kappa > 0 \longrightarrow \begin{cases} \ell_\kappa = \kappa \\ \bar{\ell}_\kappa = \kappa - 1 \end{cases} \quad \kappa < 0 \longrightarrow \begin{cases} \ell_\kappa = |\kappa| - 1 \\ \bar{\ell}_\kappa = |\kappa| \end{cases}$$

$$\psi(r, \Omega) \approx \begin{pmatrix} j_{\ell_K}(pr) \chi_K^M(\Omega) \\ i \operatorname{sgn}(\kappa) \frac{p}{E+m} j_{\bar{\ell}_K}(pr) \chi_{-K}^M(\Omega) \end{pmatrix} + \frac{q}{2E} \begin{pmatrix} \operatorname{sgn}(\kappa) \frac{p}{E+m} j_{\bar{\ell}_K}(pr) \chi_{-K}^M(\Omega) \\ i j_{\ell_K}(pr) \chi_K^M(\Omega) \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

$$A(p, \kappa) = \frac{|p|}{|j_{|\kappa|-1}(p)|} [2\kappa E + m + 2E^2]^{-1/2} \quad (5.42)$$

Hierbei bestimmt sich p aus der Gleichung

$$j_{\ell_K}(p) + \operatorname{sgn}(\kappa) \frac{p}{E+m} j_{\bar{\ell}_K}(p) = 0 \quad (5.43)$$

Tatsächlich stimmen die numerisch erhaltenen Lösungen (siehe Figur 14) und Gleichung (5.41) für kleine Werte von q völlig überein. (Schon für $q=10^{-2}$ beträgt der relative Unterschied nur noch 10^{-4} . Für realistische Werte $q \approx 10^{-8}$ ist die Übereinstimmung im Rahmen der Maschinengenauigkeit vollständig.) Damit haben wir gezeigt, daß unsere Methode für diesen einfachen Testfall funktioniert. Darüber hinaus eröffnet uns diese Analyse die Möglichkeit, auch die Konsequenzen komplizierter CP- verletzender Terme, zum Beispiel einer CP- verletzenden Quark- Quark- Wechselwirkung zu untersuchen.

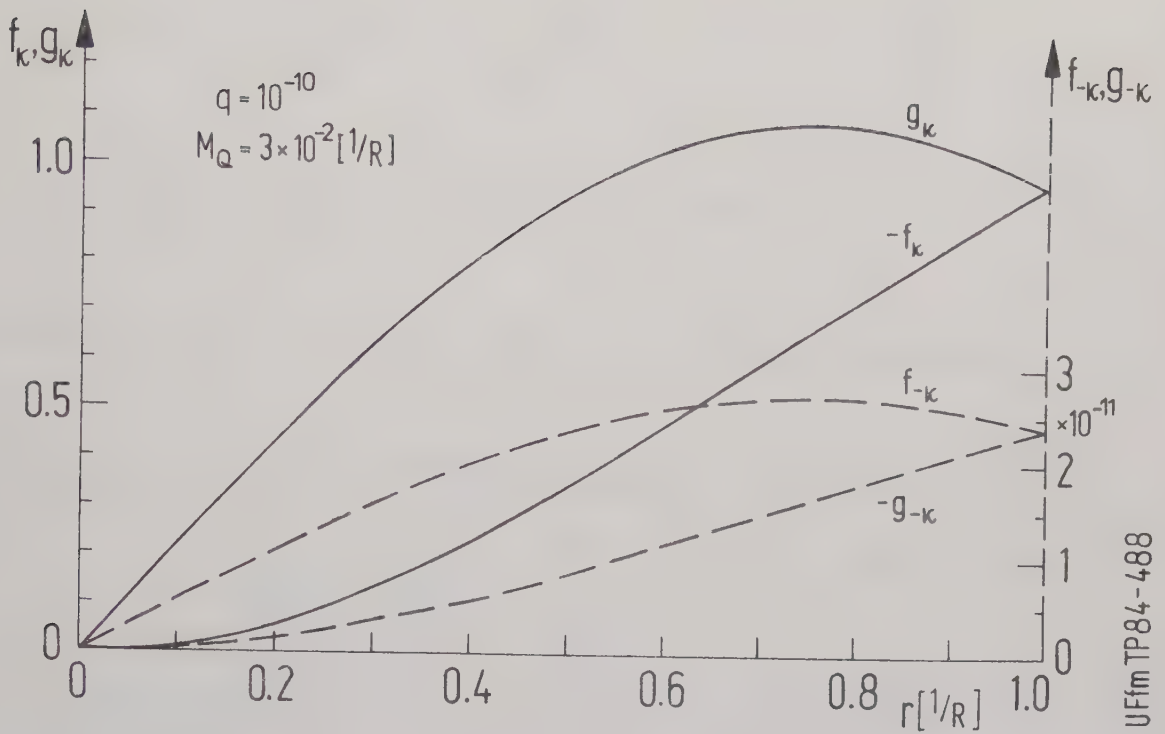


Fig.10: Die 4-komponentige Bag-Wellenfunktion

V.3 DAS ELEKTRISCHE DIPOLMOMENT DES NEUTRONS

Aus den im letzten Abschnitt erhaltenen Wellenfunktionen gilt es nun observable Größen zu berechnen. An erster Stelle steht hierbei das statische elektrische Dipolmoment des Neutrons D_n . Experimentell (Al81) weiß man, daß D_n kleiner ist als 10^{-24} e cm. Diesen Wert gilt

es nun in eine obere Schranke für Θ umzuwandeln. Hierzu muß man den Erwartungswert des Dipoloperators

$$\hat{D} = \sum_{j=1,2,3} \hat{d}(j) = e \sum_{j=1,2,3} \hat{Q}(j) r(j) \cos \vartheta(j) \quad (5.44)$$

für die Neutronen- Wellenfunktion (Th82)

$$\begin{aligned} |n\rangle = & -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{2}{3} d^\uparrow(1) d^\uparrow(2) u^\downarrow(3) - \frac{1}{3} d^\uparrow(1) d^\downarrow(2) u^\uparrow(3) - \right. \\ & - \frac{1}{3} d^\downarrow(1) d^\uparrow(2) u^\uparrow(3) - \frac{1}{3} d^\uparrow(1) u^\uparrow(2) d^\downarrow(3) + \frac{2}{3} d^\uparrow(1) u^\downarrow(2) d^\uparrow(3) \\ & - \frac{1}{3} d^\downarrow(1) u^\uparrow(2) d^\uparrow(3) - \frac{1}{3} u^\uparrow(1) d^\uparrow(2) d^\downarrow(3) - \frac{1}{3} u^\uparrow(1) d^\downarrow(2) d^\uparrow(3) + \\ & \left. + \frac{2}{3} u^\downarrow(1) d^\uparrow(2) d^\uparrow(3) \right] \quad (5.45) \end{aligned}$$

berechnen. Hierbei wirkt $d(j)$, $j=1,2,3$ auf das j -te Quark. Die Farbindizes wurden unterdrückt, da der elektrische Dipoloperator diagonal bezüglich der Farbe ist. Bei der expliziten Berechnung von

$$\langle n | \hat{D} | n \rangle \quad (5.46)$$

treten die folgenden Winkelintegrale (C.14) auf

$$\begin{aligned} \int d\Omega \chi_{\kappa}^{\mu\dagger}(\Omega) \cos\vartheta \chi_{\kappa'}^{\mu'}(\Omega) &= -\frac{2}{3} \mu \delta_{\mu\mu'} \delta_{\kappa,\kappa'} \\ |\kappa|, |\kappa'| &= 1 \end{aligned} \quad (5.47)$$

Da das auftretende Radialintegral in allen Termen gleich ist, kann man es aus (5.46) herausziehen. (Alle drei Quarks sitzen im niedrigsten s - Zustand. Sie unterscheiden sich nur in der magnetischen Quantenzahl μ und der elektrischen Ladung.)

$$\langle n | \hat{D} | n \rangle = I \cdot e \cdot \left(-\frac{1}{3}\right) \cdot \langle n | \sum_{j=1,2,3} 2\mu_j \hat{Q}_j | n \rangle$$

$$I = 2 \int d\mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \left(g_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \cdot g_{-\mathbf{r}}(\mathbf{r}) + f_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \cdot f_{-\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \right) \quad (5.48)$$

Die verbleibenden Matrixelemente sind einfach zu berechnen.

$$\langle n | \sum_{j=1,2,3} 2\mu_j \hat{Q}_j | n \rangle = 3 \cdot \frac{1}{2} \cdot$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left\{ \frac{4}{9} \langle d^\uparrow(1) d^\uparrow(2) u^\downarrow(3) | \sum_j 2\mu_j \hat{Q}_j | d^\uparrow(1) d^\uparrow(2) u^\downarrow(3) \rangle \right. \\ & + \frac{4}{9} \langle d^\uparrow(1) d^\downarrow(2) u^\uparrow(3) | \sum_j 2\mu_j \hat{Q}_j | d^\uparrow(1) d^\downarrow(2) u^\uparrow(3) \rangle \\ & \left. + \frac{4}{9} \langle d^\downarrow(1) d^\uparrow(2) u^\uparrow(3) | \sum_j 2\mu_j \hat{Q}_j | d^\downarrow(1) d^\uparrow(2) u^\uparrow(3) \rangle \right\} = \\ & = \frac{3}{2} \cdot \left\{ \frac{4}{9} \cdot \left[1 \cdot \left(-\frac{1}{3}\right) + 1 \cdot \left(-\frac{1}{3}\right) + (-1) \cdot \frac{2}{3} \right] + \right. \\ & \quad \left. + 2 \cdot \frac{4}{9} \left[1 \cdot \left(-\frac{1}{3}\right) + (-1) \cdot \left(-\frac{1}{3}\right) + 1 \cdot \frac{2}{3} \right] \right\} = \\ & = \frac{3}{2} \cdot \left\{ \frac{4}{9} \cdot \left(-\frac{4}{3}\right) + \frac{2}{9} \cdot \frac{2}{3} \right\} = -\frac{2}{3} \quad (5.49) \end{aligned}$$

Somit erhält man für das Dipolmoment des Neutrons :

$$\mathcal{D}_n = \langle n | \hat{D} | n \rangle = -\frac{2}{3} e \cdot \sin(\mu_n) \cdot \frac{I}{3q} \cdot q \quad (5.50)$$

Numerisch und analytisch findet man, daß $I/(3q)$ für kleine Werte von q konstant ist. Der erhaltene Wert ist

$$\frac{I}{3q} = 9.7827 \cdot 10^{-2} \cdot R \quad (5.51)$$

Hierbei haben wir den Bagradius R wieder eingeführt. Mit q aus Gleichung (5.19) und den Quarkmassen

$$m_u = 3\text{MeV} ; m_d = 7\text{MeV} ; m_s = 300\text{MeV} \quad (5.52)$$

(Diese Current- Quarkmassen sind sehr unsicher, siehe (Pa80,Ch82).)

folgt somit ($R \approx 1\text{fm}$) :

$$D_n \approx 6.88 \cdot 10^{-17} \quad \theta \quad [\text{e cm}] \quad (5.53)$$

Dieser Wert unterscheidet sich von demjenigen, den Baluni (Ba79) erhalten hat. Dies liegt unter anderem daran, daß sich inzwischen eine andere Definition des θ - Parameters, als sie Baluni verwendet eingebürgert hat, und zum anderen an den unterschiedlichen Quarkmassen, die verwendet wurden. Unabhängig von diesen Differenzen bleibt jedoch immer noch ein Faktor 2 übrig, um den unser Resultat größer ist. Dieser Faktor ist mit ziemlicher Sicherheit auf folgenden Umstand zurückzuführen.

Der Zusatzterm $i\beta\gamma_5 q$ bewirkt unter anderem eine Verschiebung des Schwerpunktes des Neutrons. Genauer gesagt erhält man für den Erwartungswert von z :

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{z} | n \rangle &\approx \langle n | \sum_j r(j) \cos \vartheta(j) | n \rangle = \\ &= I \cdot \langle n | \sum_j \cos \vartheta(j) | n \rangle = \\ &= -I \cdot \frac{1}{3} \cdot \langle n | \sum_j 2\mu_j | n \rangle = -\frac{1}{3} I \gamma_n(\mu_n) \end{aligned} \quad (5.54)$$

Dieses Resultat erscheint ganz natürlich, wenn man bedenkt, daß die P-Invarianz ja ebenfalls verletzt ist, so daß die neue Neutronenwellenfunktion eben nicht mehr invariant unter $z \rightarrow -z$ zu sein braucht.

$$|n(x,y,z)\rangle \neq |n(-x,-y,-z)\rangle$$

$$|n(0,0,z)\rangle \neq |n(0,0,-z)\rangle \quad (5.55)$$

Balunin unterdrückt diesen Effekt jedoch gewaltsam. Er benutzt Störungstheorie und nimmt dabei nur solche Zustände mit, für die der Neutronenschwerpunkt nicht verschoben wird. Daher ist es verständlich, daß er ein kleineres Ergebnis erhält; sein Vorgehen erscheint uns jedoch nicht gerechtfertigt. Wir gehen vielmehr davon aus, daß das Ergebnis (5.53) eine gute Näherung darstellt. Aus der experimentellen Schranke für D_n (A181):

$$|D_n| < 10^{-24} \text{ e cm} \quad (5.56)$$

erhalten wir dann

$$|\Theta| < 1.5 \cdot 10^{-8} \quad (5.57)$$

Wir haben in diesem Abschnitt gezeigt, daß sich die Techniken, die wir für die Atomphysik entwickelt haben, auf das Bag-Modell übertragen lassen. Damit eröffnet sich uns ein weiterer Bereich von Möglichkeiten, die Folgen von Symmetrieverletzungen auf der Ebene der Quarks zu studieren.

VI. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Wir haben in dieser Arbeit versucht, ein allgemeines Verfahren zur Analyse der Folgen symmetrieverletzender Zusatzwechselwirkungen für Dirac- Teilchen zu liefern. Da in der Teilchenphysik nach heutigem Wissen zwei Sorten fundamentaler Dirac- Teilchen auftreten, nämlich die Leptonen und die Quarks, gibt es im wesentlichen zwei Anwendungsgebiete für die entwickelten Methoden. Dies sind die Atomphysik und die Quark- Physik, soweit sie sich im Rahmen der Bag- Modelle beschreiben läßt. Wir haben uns hauptsächlich mit einem speziellen atomphysikalischen Problem, nämlich den Folgen der Paritätsverletzung durch neutrale Ströme für Cäsium, beschäftigt. Genauer gesagt führten wir eine Hartree- Fock- Rechnung unter Einschluß sowohl der P-verletzenden Elektron- Kern- als auch der P-verletzenden Elektron-Elektron- Wechselwirkung durch. Der Vergleich des Ergebnisses mit den experimentellen Resultaten bestätigte das Glashow- Salam- Weinberg- Modell. Wenn auch die erreichte experimentelle Genauigkeit nicht sehr groß ist, so ist diese Übereinstimmung doch wichtig, da die atomphysikalischen Experimente komplementär sind zu den Hochenergie- Experimenten. Außerdem haben wir besprochen, wie sich die Rechnung durch Berücksichtigung höherer Ordnungen in der Elektron- Elektron- Wechselwirkung noch verfeinern läßt, was jedoch in Hinblick auf die experimentelle Genauigkeit nicht sehr sinnvoll erscheint. Ein anderer, reizvollerer Ansatzpunkt für weiterführende Untersuchungen ist die Frage, ob man sich nicht vielleicht andere atomphysikalische Experimente überlegen kann, die eine genauere Bestimmung von $\sin^2\theta_w$ zulassen. Tatsächlich könnte sich dies als möglich erweisen. Da der beobachtbare Effekt der P-verletzenden Elektron- Kern- Wechselwirkung vom Überlapp der äußersten Elektronen mit dem Atomkern abhängt, kann man erwarten, daß in stark ionisierten Schwerionen sehr viel größere Effekte zu beobachten sind. Nur um dies zu illustrieren sei hier ganz

kurz ein spezielles System, nämlich heliumartiges Uran U^{90+} diskutiert.

In diesem Ion gibt es zwei fast entartete Zwei- Elektronen- Zustände unterschiedlicher Parität (siehe Figur 14 ; Go84).

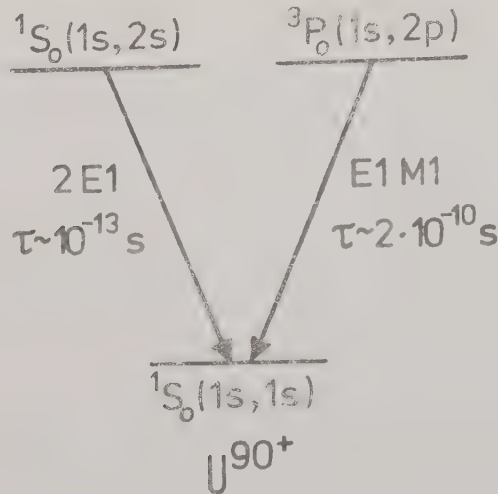


Fig.14 : Die beiden interessierenden Niveaus in U^{90+}

Da der $^3P_0(1s,2p)$ - Zustand so extrem langsam zerfällt, kommen in einem U^{90+} nach einer gewissen freien Flugstrecke praktisch nur noch $^1S_0(1s,1s)$ - und $^3P_0(1s,2p)$ - Zustände vor. In einem so präparierten System kann man versuchen, den $E1M1$ - Übergang $^3P_0(1s,2p) \rightarrow ^1S_0(1s,2s)$ durch Einstrahlen von Licht der entsprechenden Frequenz zu stimulieren. Nachweisen würde man diesen Übergang dann durch den anschließenden Zerfall $^1S_0(1s,2s) \rightarrow ^1S_0(1s,1s)$. Der Trick ist nun das Laserlicht linear zu polarisieren. Dann können nur noch $2E1$ - und $2M1$ - Übergänge stimuliert werden, so daß man aus dem Verhältnis der Zwei-Photonen- Zählraten für polarisierten und unpolarisierten Laserstrahl recht leicht die Stärke der Paritätsbeimischung berechnen kann. Nach ersten Abschätzungen könnte diese um bis zu fünf Größenordnungen größer sein als beim $6s$ - Zustand des Cäsiums. Entscheidend dafür, ob derartige Experimente möglich sein werden, ist, welche Intensität und Fokussierung des U^{90+} - Strahles erreicht werden kann.

Außer nach den P-verletzenden Effekten, die das Glashow- Salam- Weinberg- Modell vorhersagt, kann man auch nach anderen

symmetrieverletzenden Effekten in Atomen suchen, zum Beispiel nach CP- verletzenden statischen elektrischen Dipolmomenten. Man hat zwar bisher noch keinen derartigen Effekt beobachten können, aber fast alle theoretischen Modelle der Elementarteilchen sagen sie voraus oder schließen sie zumindest nicht aus. Die Aufgabe einer theoretischen Analyse wäre es in diesem Fall, möglichst viele dieser Modelle auszuschneiden. Als typisches Beispiel aus diesem Bereich haben wir in Abschnitt II.6 diskutiert, wie man aus Messungen an Atomen eine obere Schranke für das elektrische Dipolmoment des Elektrons gewinnen kann. Im Bereich der Bag- Modelle und der Farb- Wechselwirkung stellt die Beschreibung der CP- Verletzung eine große Herausforderung dar. Man steht hier vor der Aufgabe, die beobachteten Effekte im Kaon- System zu beschreiben, ohne mit der Tatsache in Konflikt zu geraten, daß in keinem anderen hadronischen System eine CP- Verletzung nachgewiesen werden konnte. In Kapitel V haben wir als Beispiel die Berechnung des elektrischen Dipolmoments des Neutrons, das auf die Vieldeutigkeit des Vakuumzustandes der Quanten- Chromodynamik zurückgeht, vorgeführt. Auch dieses Beispiel sollte hierbei nur einen Eindruck von der Weite des sich in diesem Bereich eröffnenden Feldes geben. Schließlich bietet sich noch eine andere Richtung zur Fortführung unserer Überlegungen an. Man könnte den Formalismus noch etwas erweitern, um auch die Verletzung von Erhaltungssätzen, wie zum Beispiel die Leptonenzahlerhaltung, beschreiben zu können. Insgesamt glauben wir also, daß diese Arbeit nicht nur einen Beitrag zur Bestätigung des Glashow- Salam- Weinberg- Modells leistet, sondern auch Anregungen zu einer ganzen Reihe interessanter zukünftiger Untersuchungen gibt.

ANHANG A : EINIGE KONVENTIONEN

1.) Die verwendeten Einheiten

Im allgemeinen verwenden wir natürlichen Einheiten (n.u.). Diese werden definiert durch :

$$\hbar = 1 \quad , \quad c = 1 \quad , \quad m = 1 \quad , \quad e^2 = \alpha \quad (A.1)$$

Hierbei ist m die Masse des betrachteten Dirac- Teilchens.

Im Bereich der Atomphysik sind allerdings die sogenannten atomaren Einheiten (a.u.) gebräuchlicher. Sie werden definiert durch :

$$\hbar = 1 \quad , \quad c = \frac{1}{\alpha} \quad , \quad m = 1 \quad , \quad e^2 = 1 \quad (A.2)$$

Die Umrechnung beider Einheitensysteme ineinander ist recht einfach. Wir geben sie im folgenden für die wichtigsten Größen an.

$$\text{Energien :} \quad E_{n.u.} = E / m c^2 = E_{a.u.} \cdot \alpha^2$$

$$\text{Impulse :} \quad p_{n.u.} = p / m c = p_{a.u.} \cdot \alpha$$

$$\text{Längen :} \quad r_{n.u.} = r / \frac{\hbar}{m c} = r_{a.u.} / \alpha$$

$$\text{Zeiten :} \quad t_{n.u.} = t / \frac{\hbar}{m c^2} = t_{a.u.} / \alpha^2 \quad (A.3)$$

Dirac- Wellenfunktionen :

$$\psi(r) \sim (\text{Länge})^{3/2} \quad \psi_{n.u.}(r) = (\alpha)^{3/2} \psi_{a.u.}(r)$$

2.) Die verwendete Metrik

Wir benutzen grundsätzlich die Metrik

$$g_{\mu\nu} = \text{diag} (1, -1, -1, -1) \quad (\text{A.4})$$

3. Die Gamma- Matrizen

Wir verwenden die folgende Darstellung der Gamma- Matrizen.

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$\gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_5 = i \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Man beachte, daß sich für γ_5 bisher keine Definitionen allgemein durchgesetzt hat. Vielmehr werden die Gamma- Matrizen (A.5) häufig auch mit der γ_5 - Matrix

$$\tilde{\gamma}_5 = i \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = - \gamma_5$$

kombiniert. Es empfiehlt sich daher, besonders sorgfältig auf die Definition von χ_5 zu achten, wenn schon vorliegende Ergebnisse übernehmen will, oder verschiedene Rechnungen vergleicht.

ANHANG B : DAS CPT- THEOREM

Im Laufe der Jahre hat man die Quantenfeldtheorie nicht nur immer weiter entwickelt und auf immer neue Probleme angewandt, sondern man hat auch sehr große Anstrengungen unternommen, um ihre Grundlagen streng zu formulieren. Aus diesen Bemühungen entstand das Programm der sogenannten "axiomatischen Quantenfeldtheorie". Ihr Ziel ist es, einen Satz von Axiomen und Definitionen zu finden, aus denen sich alle Eigenschaften von Quantenfeldtheorien mit mathematischer Exaktheit herleiten lassen. Großen Aufschwung haben diese Bemühungen vor allem dadurch erfahren, daß es gelang, zwei bedeutsame allgemeingültige Sätze herzuleiten, nämlich das sogenannte Spin- Statistik- Theorem und eben das CPT- Theorem. Um einen Eindruck der dabei verwendeten Vorgehensweise zu vermitteln, wollen wir in diesem Anhang die Beweisführung für die einfachste Quantenfeldtheorie, nämlich derjenigen für neutrale, skalare Felder, skizzieren. Im folgenden betrachten wir also das (i.A. komplexe) Feld $\hat{\phi}(\vec{x},t)$. Die einzige Information, über die man verfügt, ist das Verhalten des zugehörigen Feldoperators unter P, C und T :

$$\mathcal{P} \hat{\phi}(\vec{x},t) \mathcal{P}^{-1} = \hat{\phi}(-\vec{x},t) \quad (\text{B.1})$$

$$\mathcal{C} \hat{\phi}(\vec{x},t) \mathcal{C}^{-1} = \hat{\phi}(\vec{x},t) \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{T} \hat{\phi}(\vec{x},t) \mathcal{T}^{-1} = \hat{\phi}^\dagger(\vec{x},-t) \quad (\text{B.3})$$

Für die CPT- Transformation gilt also :

$$\mathcal{CTC} \hat{\phi}(\vec{x},t) (\mathcal{CTC})^{-1} = \hat{\phi}^\dagger(-\vec{x},-t) \quad (\text{B.4})$$

Eine der Grundideen der axiomatischen Feldtheorie ist es, die sogenannten Wightman- Funktionen

$$W(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle 0 | \hat{\phi}(x_1) \hat{\phi}(x_2) \dots \hat{\phi}(x_N) | 0 \rangle$$

(B.5)

$$N = 0, 1, 2, \dots$$

einzuführen. Offensichtlich beschreiben diese in ihrer Gesamtheit jede Theorie vollständig. Da man keine spezielle Quantenfeldtheorie betrachtet, also nichts über die Wechselwirkungs- Arten des ϕ - Feldes weiß, kann man die Wightman- Funktionen natürlich nicht explizit berechnen. Man kennt jedoch einige ihrer analytischen Eigenschaften. So folgt zum Beispiel aus der Forderung nach Invarianz unter den eingeschränkten Lorentztransformationen, daß es ein recht großes Gebiet G geben muß, in dem die Wightman- Funktionen analytisch sind. Mit dem N - Tupel $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ gehören hierzu auch alle hieraus durch eingeschränkte Lorentz- Transformationen erhaltenen N - Tupel $(x'_1, x'_2, \dots, x'_N)$. Zu der auf G definierten Wightman- Funktion gibt es dann eine eindeutige analytische Fortsetzung $W'(z_1, z_2, \dots, z_N)$ in das komplexe Gebiet $G' \supset G$. Aus der Tatsache, daß $W(x_1, x_2, \dots, x_N)$ gegenüber den eingeschränkten Lorentz- Transformationen (wir benutzen die Notation aus Ja75) :

$$\mathcal{L} = e^{-\vec{\omega} \cdot \hat{\vec{S}} - \vec{\xi} \cdot \hat{\vec{K}}} \quad \vec{\omega}, \vec{\xi} \text{ reell} \quad (\text{B.6})$$

invariant ist, folgt dann, daß $W'(z_1, z_2, \dots, z_N)$ gegenüber den komplexen Lorentztransformationen

$$\mathcal{L} = e^{-\vec{\omega} \cdot \hat{\vec{S}} - \vec{\xi} \cdot \hat{\vec{K}}} \quad \vec{\omega}, \vec{\xi} \text{ komplex} \quad (\text{B.7})$$

invariant sein muß. Da man durch komplexe Lorentztransformationen die einzelnen Komponenten der Lorentzgruppe aber kontinuierlich mit einander verbinden kann, folgt hieraus unter anderem

$$W'(z_1, z_2, \dots, z_N) = W'(-z_1, -z_2, \dots, -z_N) \quad (\text{B.8})$$

und insbesondere

$$\begin{aligned} W'(x_1, x_2, \dots, x_N) &= W(x_1, x_2, \dots, x_N) = \\ &= W(-x_1, -x_2, \dots, -x_N) = W'(-x_1, -x_2, \dots, -x_N) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Weiterhin kann man zeigen, daß zu G' auch reelle N -Tupel $(y_1, y_2, \dots, y_N)$ gehören, für die alle Abstände zwischen den y_i raumartig sind.

$$(\gamma_i^0 - \gamma_j^0)^2 - (\vec{\gamma}_i - \vec{\gamma}_j)^2 < 0 \quad (B.10)$$

Ein Grundaxiom der axiomatischen Quantenfeldtheorie lautet aber, daß Feldoperatoren an Punkten, deren Abstand raumartig ist, grundsätzlich miteinander vertauschen.

$$\hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) = \hat{\phi}(y) \hat{\phi}(x) \quad \text{falls} \quad (x^0 - y^0)^2 - (\vec{x} - \vec{y})^2 < 0 \quad (B.11)$$

Dieses Axiom folgt aus der allgemeinen Forderung nach Kausalität.

Man kann also durch komplexe Lorentz- Transformationen von $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ zu $(y_1, y_2, \dots, y_N)$ übergehen, für dieses N -Tupel die Argumente der Wightman- Funktion vertauschen und wieder durch komplexe Lorentz- Transformationen zu dem N -Tupel $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ zurückkehren.

$$\begin{aligned} W(x_1, x_2, \dots, x_N) &= W'(x_1, x_2, \dots, x_N) = W'(y_1, y_2, \dots, y_N) = \\ &= W'(y_N, \dots, y_2, y_1) = W'(x_N, \dots, x_2, x_1) = W(x_N, \dots, x_2, x_1) \end{aligned} \quad (B.12)$$

Aus den allgemeingültigen Gleichungen (B.9) und (B.12) kann man dann die behauptete Invarianz unter CPT herleiten. Unter dieser kombinierten Transformation geht jede Wightman- Funktion nämlich in

$$W(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle 0 | \hat{\phi}(x_1) \hat{\phi}(x_2) \dots \hat{\phi}(x_N) | 0 \rangle$$

$$\xrightarrow{\text{CPT}} W_{\text{CPT}}(x_1, x_2, \dots, x_N) =$$

$$\begin{aligned}
&= \langle 0 | \mathcal{CPT} \cdot (\hat{\phi}(x_1) \hat{\phi}(x_2) \dots \hat{\phi}(x_N)) \cdot (\mathcal{CPT})^{-1} | 0 \rangle^* \\
&= \langle 0 | \hat{\phi}^\dagger(x_1) \hat{\phi}^\dagger(-x_2) \dots \hat{\phi}^\dagger(-x_N) | 0 \rangle^* \\
&= \langle 0 | \hat{\phi}(-x_N) \dots \hat{\phi}(-x_2) \hat{\phi}(-x_1) | 0 \rangle \\
&= W(-x_N, -x_{N-1}, \dots, -x_2, -x_1) \quad (B.13)
\end{aligned}$$

über. Mit Gleichung (B.9) folgt dann :

$$W_{\mathcal{CPT}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = W(x_N, x_{N-1}, \dots, x_2, x_1) \quad (B.14)$$

und Gleichung (B.12) liefert schließlich

$$W_{\mathcal{CPT}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = W(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (B.15)$$

Alle Wightman- Funktionen sind also invariant gegen die Transformation CPT und das heißt :

Jede Quantenfeldtheorie für neutrale, skalare Teilchen ist invariant unter CPT.

Dies beendet unsere Beweisskizze. In Wirklichkeit muß natürlich jeder einzelne Schritt sorgfältig aus den funktionentheoretischen Sätzen hergeleitet werden. Man kann sich leicht vorstellen, daß dies noch weit aufwendiger wird, wenn man geladene Felder mit Spin oder verschiedene miteinander wechselwirkende Felder betrachtet. Der Beweis läßt sich jedoch auch für diese Fälle führen. Ohne daß wir hier näher darauf eingehen, sollte doch der folgende Zusammenhang deutlich geworden sein :

Im Rahmen der axiomatischen Feldtheorie ist es möglich aus den Analytizitäts- Eigenschaften der Wightman- Funktionen zu folgern, daß jede Quantenfeldtheorie invariant sein muß unter der CPT- Transformation. Die verwendeten Analytizitäts- Eigenschaften gewinnt man hier-

bei aus grundsätzlichen, physikalischen Forderungen wie der Lorentz-Invarianz und der Forderung nach Kausalität.

ANHANG C : EINIGE WICHTIGE BEZIEHUNGEN

In diesem Anhang sind einige bekannte Definitionen und Beziehungen für die Drehimpulseigenfunktionen aufgeführt, die in dieser Arbeit benutzt werden. (Man findet sie in den Lehrbüchern zur Quantenelektrodynamik.)

Wir beginnen mit der Definition der Kugelflächenfunktionen :

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi} \quad (C.1)$$

mit den Legendre- Polynomen

$$P_{\ell}^m(x) = (-)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_{\ell}(x) \quad \text{für } m > 0 \quad (C.2)$$

$$P_{\ell}^{-m}(x) = (-)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(x) \quad (C.3)$$

$$P_{\ell}^0(x) = P_{\ell}(x) \quad (C.4)$$

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2-1)^{\ell} \quad (C.5)$$

die so definierten Kugelflächenfunktionen haben folgende Eigenschaften :

$$Y_{\ell, -m}(\Omega) = (-)^m Y_{\ell, m}^*(\Omega) \quad (C.6)$$

$$\int d\Omega \, Y_{\ell' m'}^*(\Omega) Y_{\ell m}(\Omega) = \delta_{\ell' \ell} \delta_{m' m} \quad (C.7)$$

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\ell=-m}^m Y_{\ell m}^*(\vartheta', \varphi') Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta') \quad (C.8)$$

Die Kugelflächenfunktionen bilden einen vollständigen Satz orthogonaler Funktionen. Man kann daher gegebene Funktionen nach den $Y_{\ell m}$'s entwickeln. Wir zitieren hier nur eine solche Entwicklung :

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{1}{2\ell+1} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\vartheta', \varphi') Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \quad (C.9)$$

$r_{<} = \min(r, r') \quad r_{>} = \max(r, r')$

Schließlich sei noch angegeben, welchen Wert ein Integral über drei Kugelflächenfunktionen annimmt.

$$\begin{aligned} \int d\Omega \, Y_{\ell' m'}^*(\Omega) Y_{L M}(\Omega) Y_{\ell m}(\Omega) &= \\ &= (-)^{m'} \sqrt{\frac{(2\ell'+1)(2L+1)(2\ell+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell' & L & \ell \\ -m' & M & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & L & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (C.10)$$

Als nächstes betrachten wir die Matrixelemente von Kugelflächenfunktionen bezüglich der spärischen Spinoren

$$\chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) = (-)^{\frac{1}{2} - \ell - \mu} \sum_m \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ \mu - m & m & -\mu \end{pmatrix} Y_{\ell m}(\Omega) \chi^m \quad (C.11)$$

$$\chi^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (C.12)$$

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2} \quad ; \quad \ell = \begin{cases} \kappa & \text{für } \kappa > 0 \\ -(\kappa+1) & \text{für } \kappa < 0 \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

Mit Hilfe von Gleichung (C.10) erhält man :

$$\begin{aligned} & \int d\Omega \left(\chi_{\kappa'}^{\mu'}(\Omega) \right)^\dagger Y_{LM}(\Omega) \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) = \\ & = (-)^{j'-\mu'} \begin{pmatrix} j & j' & L \\ \mu & -\mu' & M \end{pmatrix} \cdot (-)^{\kappa'} \sqrt{\frac{|\kappa \kappa'| (2L+1)}{\pi}} \begin{pmatrix} j & j' & L \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

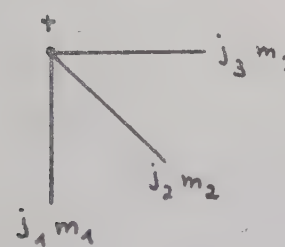
Von den weiteren Eigenschaften der sphärischen Spinoren sei hier nur noch ihre Orthogonalitätsrelation angegeben.

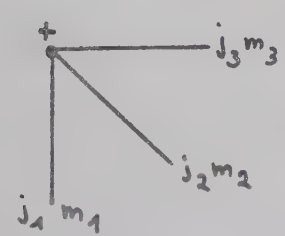
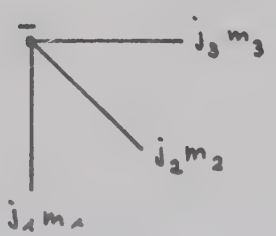
$$\int d\Omega \left[\chi_{\kappa'}^{\mu'}(\Omega) \right]^\dagger \chi_{\kappa}^{\mu}(\Omega) = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\kappa\kappa'} \quad (\text{C.15})$$

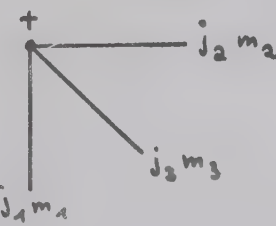
ANHANG D : DIE GRAPHEN ZUR DREHIMPULSKOPPLUNG

Steht man vor dem Problem die Drehimpulskopplungen von fünf, sechs oder noch mehr Drehimpulsen zu berechnen, so führt das gewöhnliche Vorgehen mit expliziter Summation über ein Vielfachprodukt von 3j- , 6j- und 9j- Symbolen bald nicht mehr weiter, weil die Ausdrücke viel zu lang werden, um noch überblickt und fehlerfrei umgeformt werden zu können. Daher hat man schon recht früh effizientere Techniken entwickelt. Bei diesen Techniken ersetzt man die einzelnen Komponenten durch graphische Symbole und leitet dann einen Kanon von Regeln ab, nach dem man diese Drehimpulsgraphen umformen kann (Ya62, DF65, EB67, DG71). Wir benutzen das System von I.Lindgren und J.Morrison (LM82), das auf ein System von D.M.Brink, G.R.Satchler und P.G.H.Sandars zurückgeht. In diesem Anhang fassen wir kurz die wichtigsten Formeln zusammen, ohne Ableitungen anzugeben. Diese findet man in LM82.

Definitionen :


 $= \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$
(D.1)


 $= (-)^{j_1+j_2+j_3}$

 $=$
(D.2)

$= (-)^{j_1+j_2+j_3}$

211

$$\overline{j_m \quad j'_m} = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (D.3)$$

$$\overrightarrow{j_m \quad j'_m} = (-)^{j+m} \overline{j_m \quad j'_m} \quad (D.4)$$

$$\overline{j_m} = [j]^{1/2} \overline{j_m} \quad (D.5)$$

$$\overline{j} = \sum_{M=-j}^j \overline{jM} \quad (D.6)$$

Sätze :

$$\begin{array}{c} + \\ \swarrow \quad \downarrow \quad \searrow \\ j_3 m_3 \quad j_4 m_4 \quad j_2 m_2 \end{array} = \begin{array}{c} + \\ \swarrow \quad \downarrow \quad \searrow \\ j_3 m_3 \quad j_4 m_4 \quad j_2 m_2 \end{array} = \begin{array}{c} + \\ \swarrow \quad \downarrow \quad \searrow \\ j_3 m_3 \quad j_4 m_4 \quad j_2 m_2 \end{array} \quad (D.7)$$

$$\overrightarrow{j_m \quad j'_m} = (-)^{2j} \overrightarrow{j_m \quad j'_m} \quad (D.8)$$

$$\overrightarrow{j_1 m_1} \quad \overleftarrow{j'_1 m'_1} = \overrightarrow{j_1 m_1} \quad \overrightarrow{j'_1 m'_1} = \overrightarrow{j_1 m_1} \quad \overleftarrow{j'_1 m'_1} \quad (D.9)$$

$$(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3) = \begin{array}{c} j_3 m_3 \quad + \quad j_4 m_4 \\ \downarrow \\ j_2 m_2 \end{array} \quad (D.10)$$

Das Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle \gamma j m | t_{kq} | \gamma' j' m' \rangle = \langle \gamma j || t_k || \gamma' j' \rangle$$

$$\begin{array}{c} j m \quad + \quad j' m' \\ | \\ k \quad q \end{array}$$

(D.11)

t_{kq} : Tensor - Operator

$$\begin{array}{c} j_1 m_1 \\ | \\ + \quad \circ \circ \\ | \\ j_2 m_2 \end{array} = [j_1]^{-1/2} \begin{array}{c} j_1 m_1 \\ | \\ \uparrow \\ j_2 m_2 \end{array} \quad (D.12)$$

$$\boxed{\text{diagonal lines}} \xrightarrow{j m} \cdot \xleftarrow{j m} \boxed{\text{diagonal lines}} = \boxed{\text{diagonal lines}} \xrightarrow{j m} \boxed{\text{diagonal lines}} \quad (D.13)$$



steht für einen beliebigen Graph

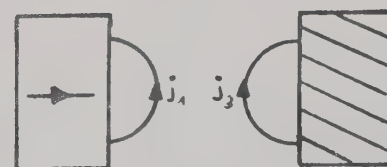
$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \\ j_7 & j_8 & j_9 \end{matrix} \right\} = + \quad \text{(D.17)}$$

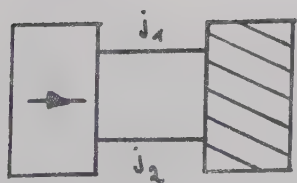
Für die folgenden Sätze muß gelten :

Alle Linien in  tragen einen Pfeil.

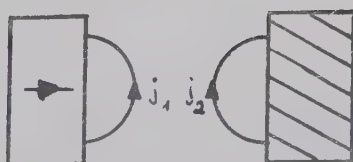


(D.18)

$$= \frac{\delta_{j_1,0} \delta_{j_1,j_2} \delta_{j_3,j_4}}{[j_1,j_3]^{1/2}} \quad \text{(D.18)}$$


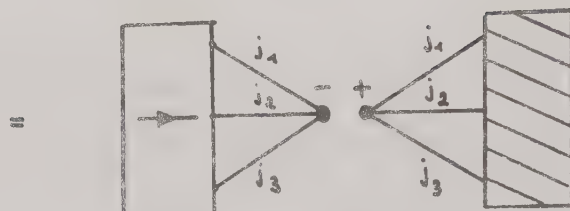


(D.19)

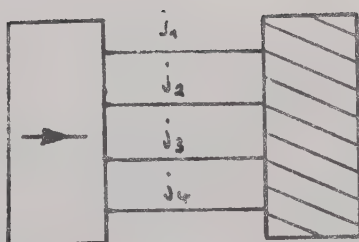
$$= \frac{\delta_{j_1,j_3}}{[j_1]} \quad \text{(D.19)}$$




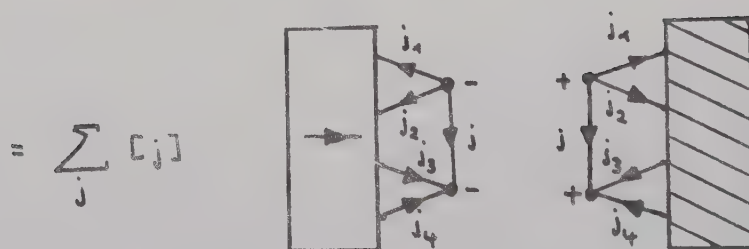
is



(D.20)



is



(D.21)

Als Beispiele für die Anwendung dieser graphischen Methode zur Drehimpulskopplung geben wir hier die Ableitung der Gleichungen (2.218) und einer zweiten Beziehung an.

Zu berechnen ist

$$|k|, |k'| = 1$$

$$\begin{aligned}
 & \langle \chi_\mu | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \chi'_{\mu'} \rangle = \\
 & = \int d\Omega \quad (-)^{\frac{1}{2}-\ell-\mu} \sum_{\substack{m, m' \\ M}} \sqrt{2} \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \mu-m & m & -\mu \end{pmatrix} Y_{\ell}^{\mu-m}(\Omega) \cdot \\
 & \cdot \left(\chi^m \cdot \vec{\sigma} \chi^{m'} \cdot \vec{\xi}_{-M'} \right) \cdot (-)^{1+M} \sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -M' & M+M' & -M \end{pmatrix} Y_2^{M+M'}(\Omega) \cdot \\
 & \cdot (-)^{\frac{1}{2}-\ell'-\mu'} \sqrt{2} \begin{pmatrix} \ell' & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \mu'-m' & m' & -\mu' \end{pmatrix} Y_{\ell'}^{\mu'-m'}(\Omega) \quad (D.22)
 \end{aligned}$$

Um diesen Ausdruck auszuwerten formen wir den Term mit σ folgendermaßen um :

$$\begin{aligned}
 & \chi^m \cdot \vec{\sigma} \chi^{m'} \cdot \vec{\xi}_{-M'} = \\
 & = \sqrt{2} \delta_{M',1} \delta_{m,\frac{1}{2}} \delta_{m',\frac{1}{2}} - \sqrt{2} \delta_{M',1} \delta_{m,-\frac{1}{2}} \delta_{m',\frac{1}{2}} + \\
 & + \delta_{M',0} \left[\delta_{m,\frac{1}{2}} \delta_{m',-\frac{1}{2}} - \delta_{m,-\frac{1}{2}} \delta_{m',\frac{1}{2}} \right] = \\
 & = \sqrt{6} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ m' & -M' & -m \end{pmatrix} (-)^{\frac{1}{2}+m} = -\sqrt{6} \begin{array}{c} \frac{1}{2} m' \quad + \quad \frac{1}{2} m \\ \hline 1 \quad | \quad -M' \end{array} \quad (D.23)
 \end{aligned}$$

mit

$$\vec{\Sigma}_0 \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\Sigma}_1 \cdot \vec{\sigma} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + i\sigma_y) = -\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\Sigma}_{-1} \cdot \vec{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x - i\sigma_y) = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(D.24)

und den Definitionen (D.1) bis (D.4). Somit lautet Gleichung (D.22)

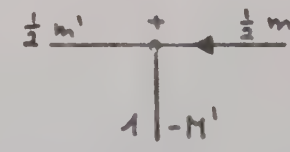
$$\langle \kappa \mu | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa' \mu' \rangle =$$

(D.25)

$$= \sum_{\substack{n, m, M \\ n', m', M'}} (-)^{\frac{1}{2} + \mu} \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ n & m & -\mu \end{pmatrix} (-)^{1-\ell} \cdot 2\sqrt{3}\sqrt{6} \cdot$$

$$\cdot (-)^{1+\mu'} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -M' & N' & -M \end{pmatrix} \cdot (-)^{\frac{1}{2} + \mu'} \begin{pmatrix} \ell & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ n' & m' & -\mu' \end{pmatrix} \cdot (-)^{1-\ell'} \cdot$$

$$\cdot \int d\Omega Y_{\ell}^{n*}(\Omega) Y_2^{N'}(\Omega) Y_{\ell'}^{n'}(\Omega) \cdot$$



Hierbei haben wir formal zusätzliche Größen n' , n , N' eingeführt, die aber durch die 3j-Symbole auf die Werte in Gleichung (D.22) festgelegt werden.

$$= \sum_{\substack{m, m', M' \\ n, n', N'}} \begin{array}{c} \ell n \quad + \quad \frac{1}{2} \mu \\ \frac{1}{2} \mid m \end{array} \quad \begin{array}{c} \ell' n' \quad + \quad \frac{1}{2} \mu' \\ \frac{1}{2} \mid m' \end{array} \quad \begin{array}{c} 1 \quad + \quad 1 \\ -M' \quad \mid \quad M' \end{array} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} m' \quad + \quad \frac{1}{2} m \\ 1 \mid -M' \end{array} \cdot (-)^{\ell - \ell'} \cdot 6\sqrt{2} \cdot$$

$$\cdot \int d\Omega \quad Y_{\ell}^{n*}(\Omega) \quad Y_2^{N'}(\Omega) \quad Y_{\ell'}^{n'}(\Omega) \quad (D.26)$$

Das Integral lässt sich leicht berechnen (siehe Gleichung (C.10)).

$$\begin{aligned} & \int d\Omega \quad Y_{\ell}^{n*}(\Omega) \quad Y_2^{N'}(\Omega) \quad Y_{\ell'}^{n'}(\Omega) = \\ & = (-)^n \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1) \cdot 5}{4\pi}} \quad \begin{pmatrix} \ell & 2 & \ell' \\ -n & N' & n' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & 2 & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ & = -\delta_{\ell,1} \delta_{\ell',1} \quad (-)^{n+1} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ n' & N' & -n \end{pmatrix} \\ & = -\delta_{\ell,1} \delta_{\ell',1} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \quad \begin{array}{c} 1 n' \quad + \quad 1 n \\ 2 \mid N' \end{array} \quad (D.27) \end{aligned}$$

Wir setzen dies in Gleichung (D.26) ein und verbinden die Graphen.

$$\langle \kappa, \mu | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \gamma', \mu' \rangle =$$

$$= \sum_{\substack{m, m', M' \\ n, n', N'}} -6 \sqrt{\frac{3}{\pi}} \delta_{\kappa,1} \delta_{\gamma',1}$$

$$= -6 \sqrt{\frac{3}{\pi}} \delta_{\kappa,1} \delta_{\gamma',1}$$

(D.28)

Gemäß Gleichung (D.7) und (D.9) ist dies äquivalent zu

$$= -6 \sqrt{\frac{3}{\pi}} \delta_{\kappa,1} \delta_{\gamma',1}$$

(D.29)

Dies vereinfacht sich mit Hilfe der Regel (D.20) wesentlich.

$$= -6 \sqrt{\frac{3}{\pi}} \delta_{\kappa,1} \delta_{\kappa',1}$$

(D.30)

Der geschlossene Graph stellt ein 9j- Symbol dar. Aus Gleichung (D.17) lesen wir unter Verwendung von (D.2) ab :

=
=

=

$$\left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & 2 & 1 \end{matrix} \right\}$$

(D.31)

Zur Berechnung des 9j- Symbols benutzen wir die Tabelle R059.

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{Bmatrix} &= \frac{1}{3} \left[- \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & 1 \end{Bmatrix} \right] \cdot \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{Bmatrix}^{-1} \\ &= -\frac{1}{3} \begin{Bmatrix} \frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} = \frac{1}{9} \end{aligned} \quad (D.32)$$

Somit haben wir

$$\begin{aligned} \langle \kappa, \mu | \vec{Y}_{1,2,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa', \mu' \rangle &= \\ &= \frac{2}{\sqrt{3}\pi} \delta_{\kappa, \kappa'} \delta_{\mu, \mu'} \end{aligned} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2}\mu \quad \quad \frac{1}{2}\mu' \\ \quad \quad + \\ \quad \quad | \\ 1 \quad M \end{array} \quad (D.33)$$

erhalten.

Wir wollen auch noch das Matrixelement

$$\langle \kappa, \mu | \vec{Y}_{1,1,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa', \mu' \rangle \quad |\kappa|, |\kappa'| = 1 \quad (D.34)$$

berechnen. In diesem Fall lautet Gleichung (D.26) :

$$\langle \kappa, \mu | \vec{Y}_{1,1,M} \cdot \vec{S} | \kappa', \mu' \rangle =$$

$$= \sum_{\substack{m, m', M' \\ n, n', N'}} \begin{array}{c} e_n \quad + \quad \frac{1}{2} \mu \\ \frac{1}{2} \mid m \end{array} \quad \begin{array}{c} e'_{n'} \quad + \quad \frac{1}{2} \mu' \\ \frac{1}{2} \mid m' \end{array} \quad \begin{array}{c} 1 \quad + \quad 1 \\ -M' \quad \mid \quad M' \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \frac{1}{2} m' \quad + \quad \frac{1}{2} m \\ 1 \mid -M' \end{array} \quad (-)^{e-e'} \quad 6\sqrt{2} \quad \int d\Omega \quad Y_e^{n*}(\Omega) \quad Y_1^{N'}(\Omega) \quad Y_{e'}^{n'}(\Omega)$$

(D.35)

Das Integral über die Kugelflächenfunktionen liefert :

$$\int d\Omega \quad Y_e^{n*}(\Omega) \quad Y_1^{N'}(\Omega) \quad Y_{e'}^{n'}(\Omega) =$$

$$= (-)^n \sqrt{\frac{[e, e'] \cdot 3}{4\pi}} \quad \begin{pmatrix} e & 1 & e' \\ -n & N' & n' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & 1 & e' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \quad \left[\delta_{e,0} \delta_{e',1} \delta_{n,0} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & N' & n' \end{pmatrix} + \right. \\ \left. + (-)^{N'} \delta_{e,1} \delta_{e',0} \delta_{n',0} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -n & N' & 0 \end{pmatrix} \right] =$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \quad \left[\delta_{e,0} \delta_{e',1} \delta_{n,0} \delta_{n',-N'} \left(\delta_{N',1} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} + \delta_{N',-1} \frac{1}{\sqrt{3}} - \right. \right. \\ \left. \left. - \delta_{N',0} \frac{1}{\sqrt{3}} \right) + \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + (-)^{N'} \delta_{e,1} \delta_{e',0} \delta_{n',0} \delta_{n,N'} \left(\delta_{N',1} \frac{1}{\sqrt{3}} + \delta_{N',-1} \frac{1}{\sqrt{3}} - \delta_{N',0} \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \Big] \\
 & = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\delta_{e,0} \delta_{e',1} \delta_{n,0} \delta_{n',-N'} (-)^{N'} + \delta_{e,1} \delta_{e',0} \delta_{n,N'} \delta_{n',0} \right)
 \end{aligned}$$

(D.36)

wir setzen dieses Ergebnis in (D.35) ein.

$$\begin{aligned}
 \langle \kappa, \mu | \vec{Y}_{1,1,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa', \mu' \rangle &= \sum_{\substack{m, m', M' \\ N'}} -6 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\
 & \cdot \left\{ \delta_{e,0} \delta_{e',1} (-)^{N'} \begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \begin{array}{c} \text{Top line: } \xrightarrow{\frac{1}{2} M} \\ \text{Bottom line: } \downarrow \frac{1}{2} m \\ \text{Vertex: } + \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{Diagram 2: } \begin{array}{c} \text{Top line: } \xrightarrow{\frac{1}{2} \mu'} \\ \text{Bottom line: } \downarrow \frac{1}{2} m' \\ \text{Vertex: } + \end{array} \end{array} \right. \\
 & \quad \cdot \begin{array}{c} \text{Diagram 3: } \begin{array}{c} \text{Top line: } \xrightarrow{1 M} \\ \text{Bottom line: } \downarrow 1 N' \\ \text{Vertex: } + \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{Diagram 4: } \begin{array}{c} \text{Top line: } \xrightarrow{\frac{1}{2} m} \\ \text{Bottom line: } \downarrow 1 -M' \\ \text{Vertex: } + \end{array} \end{array} \\
 & + \delta_{e,1} \delta_{e',0} \begin{array}{c} \text{Diagram 5: } \begin{array}{c} \text{Top line: } \xrightarrow{\frac{1}{2} \mu} \\ \text{Bottom line: } \downarrow \frac{1}{2} m \\ \text{Vertex: } + \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{Diagram 6: } \begin{array}{c} \text{Top line: } \xrightarrow{\frac{1}{2} \mu'} \\ \text{Bottom line: } \downarrow \frac{1}{2} m' \\ \text{Vertex: } + \end{array} \end{array}
 \end{aligned}$$

$$\left. \begin{array}{c} \begin{array}{c} \frac{1}{-M'} \\ \hline + \\ \hline 1 \\ | \\ N' \end{array} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} m' \\ \hline + \\ \hline 1 \\ | \\ -M' \end{array} \end{array} \right\} \quad (D.37)$$

Nun verwenden wir die Beziehungen (D.4) und (D.12). Außerdem fassen wir wieder die einzelnen Graphen zu einem Gesamtgraph zusammen, mit der Konvention, daß über nicht angegebene magnetische Quantenzahlen summiert wird.

$$= \frac{3}{\sqrt{\pi}} \sum_{N'} \left\{ \begin{array}{c} \begin{array}{c} + \\ \hline \frac{1}{2} \\ \hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline \frac{1}{2} \mu' \end{array} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} M \\ \hline + \\ \hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline M \end{array} \end{array} \cdot (-)^{N'} \cdot (-)^{1+N'} + \right. \\ \left. + \begin{array}{c} - \\ \hline \frac{1}{2} \\ \hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline \frac{1}{2} \mu' \end{array} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} M \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline M \end{array} \right\} \quad (D.38)$$

Mit Hilfe von (D.2) und (D.7) erhalten wir hieraus :

$$\langle \kappa_{\mu} | \vec{Y}_{1,1,M} \cdot \vec{\sigma} | \kappa' \mu' \rangle = \frac{3}{\sqrt{\pi}} \cdot$$

$$\left\{ \begin{array}{c} \begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline \frac{1}{2} \mu' \end{array} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} M \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline M \end{array} \end{array} \delta_{e,0} \delta_{e',1} - \begin{array}{c} \begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline \frac{1}{2} \mu' \end{array} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} M \\ \hline - \\ \hline 1 \\ \hline 1 \\ \hline M \end{array} \end{array} \delta_{e,1} \delta_{e',0} \right\}$$

(D.39)

Durch Verwendung der Gleichungen (D.19) und (D.16) folgt schließlich :

$$\begin{aligned}
 \langle \kappa, \mu | \vec{Y}_{1,1,M} \cdot \vec{S} | \kappa', \mu' \rangle &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} (-\kappa) \delta_{\kappa, -\kappa'} \cdot \\
 &\quad \cdot \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 \end{array} \right\} + \begin{array}{c} \downarrow \frac{1}{2} \mu \\ + \\ \uparrow \frac{1}{2} \mu' \end{array} \quad 1M \\
 &= \frac{\kappa}{\sqrt{\pi}} \delta_{\kappa, -\kappa'} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} \mu \quad + \quad \frac{1}{2} \mu' \\ \rightarrow \quad \bullet \quad \leftarrow \\ | \\ 1M \end{array} = \\
 &= \frac{-\kappa}{\sqrt{\pi}} \delta_{\kappa, -\kappa'} \quad \begin{array}{c} \frac{1}{2} \mu \quad + \quad \frac{1}{2} \mu' \\ \leftarrow \quad \bullet \quad \rightarrow \\ | \\ 1M \end{array} \quad (D.40)
 \end{aligned}$$

Dies ist das Resultat, daß wir in Abschnitt II.4.2 verwenden.

ANHANG E : DIE HERLEITUNG DER RPA- GLEICHUNGEN

Um die RPA- Gleichungen (2.241) bis (2.245) zu erhalten, müssen wir zuerst die in (2.227) auftretenden Graphen berechnen.

Wir beschränken uns hier darauf, das Prinzip der Rechnung an einem Beispiel vorzuführen. Hierzu berechnen wir zuerst den Graphen (0a).



(E.1)

Wir bezeichnen den elektro-magnetischen Multipoloperator, der an die Elektronen koppelt mit $\hat{h}_{JM}$. Der Graph (E.1) ist dann einfach das Matricelement

$$\langle v \mu_v | \hat{h}_{JM} | v \mu_v \rangle = \langle v || \hat{h}_J || v \rangle$$

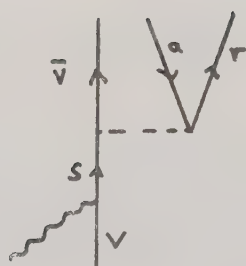

(E.2)

Wir kennzeichnen den Anfangs- und Endzustand mit J_i, M_i und J_f, M_f und schreiben für (E.2)

$$\langle J_f M_f | \hat{h}_{JM} | J_i M_i \rangle = \langle J_f || \hat{h}_J || J_i \rangle$$


(E.3)

Dieses war offensichtlich ein recht triviales Beispiel. Komplizierter wird die Situation für den zweiten Graphen, den wir betrachten wollen.



(E.4)

Um diesen Graphen zu berechnen, legen wir uns zuerst auf ein bestimmtes Kopplungsschema im Endkanal fest, und zwar koppeln wir den Lochzustand a und v zunächst zu einem Drehimpuls J_c und diesen dann mit r zu J_f . Die Clebsch- Gordon- Koeffizienten dieser Kopplung haben die graphische Darstellung :

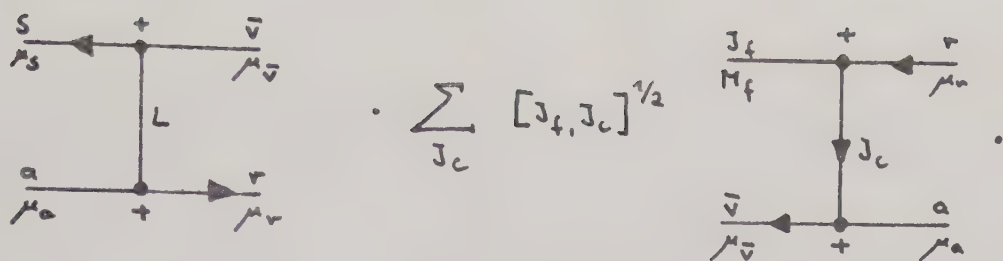
$$[[\alpha' \times \bar{v}]_{J_c} \times r]_{J_f} \cong \sum_{J_c} \frac{J_f}{M_f} \text{ (diagram) } \quad (E.5)$$

Mit diesem Faktor muß man

$$- \sum_{s, \mu_s} \frac{\langle r \mu_r; \bar{v} \mu_{\bar{v}} | g | a \mu_a; s \mu_s \rangle \langle s \mu_s | h_{3N} | v \mu_v \rangle}{E_s - E_v - \omega} \quad (E.6)$$

noch multiplizieren, um das gewünschte Matrixelement zu erhalten. Anschließend ist über μ_a , μ_r und μ_v zu summieren, da ja nur M_f eine gute Quantenzahl ist. Außerdem setzen wir das Coulomb- Matrixelement (2.138) ein.

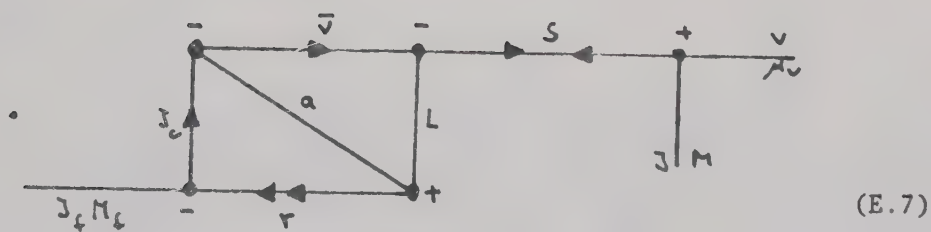
$$T_{fc} = - \sum_{\substack{s, L \\ \mu_s, \mu_r, \mu_a, \mu_v}} G_L(r a, \bar{v} s) (-)^{r-a+s-\bar{v}} .$$



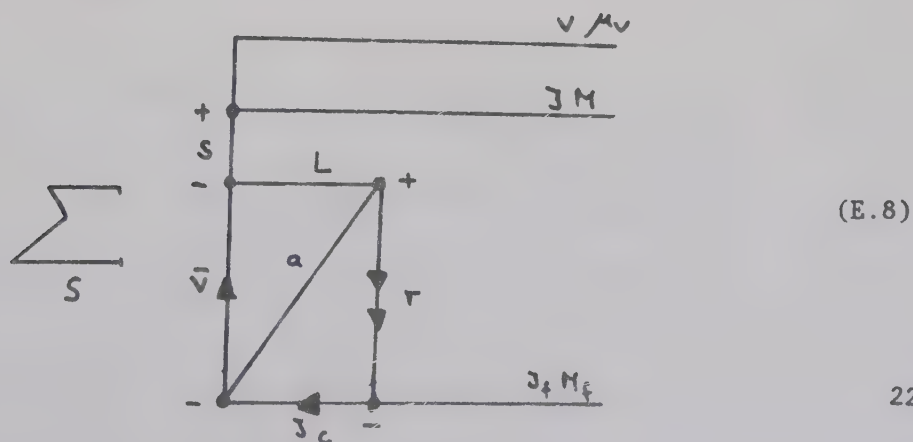
$$\cdot \sum_{J_c} [J_f, J_c]^{1/2} \cdot \frac{\langle s \| \hat{h}_3 \| v \rangle}{E_s - E_v - \omega}$$

$$= - \sum_{s, L, J_c} [J_f, J_c]^{1/2} (-)^{r-a+s-v} \cdot$$

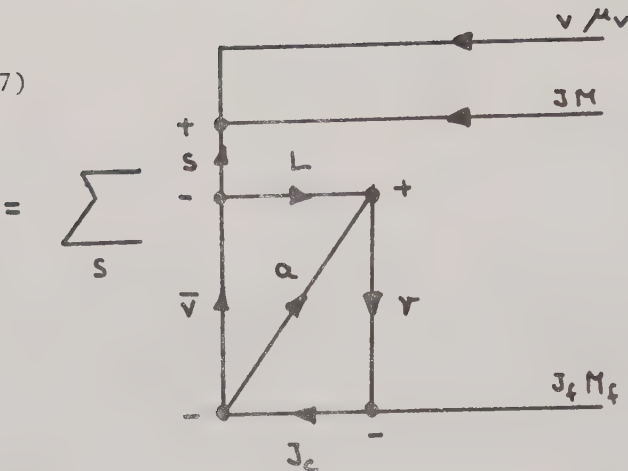
$$\cdot \frac{G_L(\omega, \bar{v}, s) \langle s \| \hat{h}_3 \| v \rangle}{E_s - E_v - \omega}$$



Die Berechnung der Drehimpulskopplung erfolgt mit den in Anhang D dargestellten Regeln.

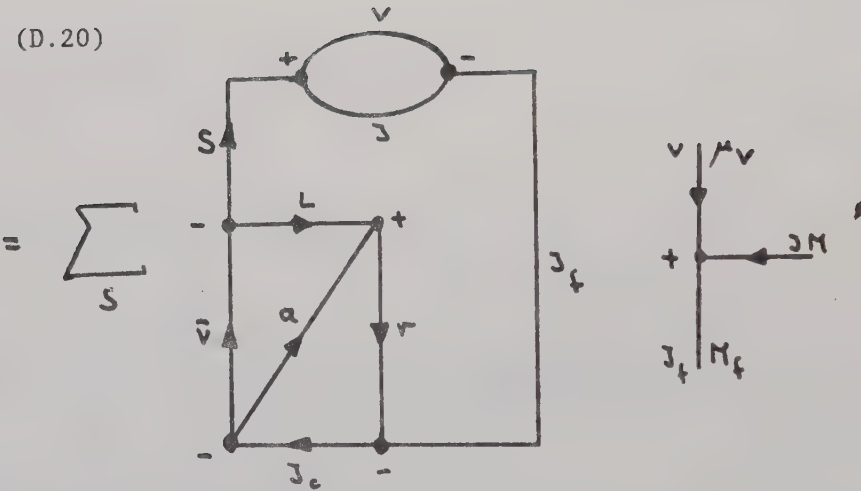


mit (D.7)



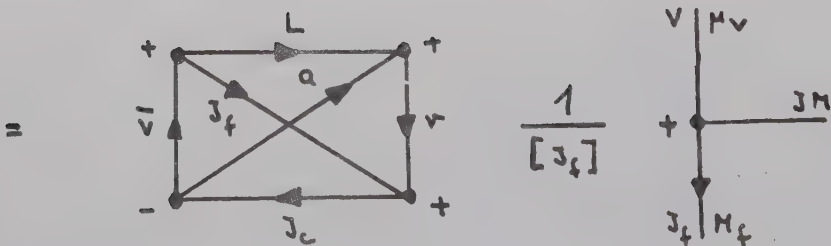
(E.9)

mit (D.20)



(E.10)

mit (D.14)



(E.11)

mit (D.8) und (D.2)

$$= (-)^{L+a+v} (-)^{2\bar{v}} + \text{Diagram 1} + \frac{1}{[J_f]} + \text{Diagram 2} \quad (\text{E.12})$$

Diagram 1: A diamond-shaped graph with four vertices. The top vertex is labeled with a minus sign. The left vertex is labeled with a plus sign. The bottom vertex is labeled with a minus sign. The right vertex is labeled with a plus sign. The edges are labeled: top-left edge is \$L\$, top-right edge is \$r\$, bottom-left edge is \$\bar{v}\$, bottom-right edge is \$J_c\$, left edge is \$J_f\$, and right edge is \$a\$.

Diagram 2: A graph with a central vertex labeled with a plus sign. It has four edges: top edge is \$v\$, bottom edge is \$J_f\$, left edge is \$J_f\$, and right edge is \$J_M\$.

mit (D.16)

$$= -(-)^{L+a+v} \left\{ \begin{matrix} L & \bar{v} & J_f \\ J_c & r & a \end{matrix} \right\} [J_f]^{-1} + \text{Diagram 3} \quad (\text{E.13})$$

Diagram 3: A graph with a central vertex labeled with a plus sign. It has four edges: top edge is \$J_f\$, bottom edge is \$J_f\$, left edge is \$J_f\$, and right edge is \$J_M\$.

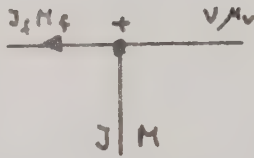
Für das Matrixelement T_{fi} erhalten wir somit

$$T_{fi} = - \sum_{\substack{L, J_c \\ S=J_f}} \frac{G_L(r, \bar{v}, s) \langle s || h || v \rangle}{E_s - E_v + \omega} (-)^{J_f - \bar{v} + L} \left(\frac{[J_c]}{[J_f]} \right)^{1/2} \cdot \left\{ \begin{matrix} L & \bar{v} & J_f \\ J_c & r & a \end{matrix} \right\} + \text{Diagram 4} \quad (\text{E.14})$$

Diagram 4: A graph with a central vertex labeled with a plus sign. It has four edges: top edge is \$J_f\$, bottom edge is \$J_f\$, left edge is \$J_f\$, and right edge is \$J_M\$.

Wenn wir Gleichung (E.14) mit (E.3) vergleichen, erkennen wir, daß sie sich in der Form

$$T_{fi} = \langle v || h || s' \rangle \quad (\text{E.15})$$

$$|s'\rangle = - \sum_{L, J_c, s=J_f} \frac{G_L(r a, \bar{v} s)}{\hat{H}_{HF} - \epsilon_v + \omega} |s\rangle (-)^{J_f - \bar{v} + L} \cdot \left\{ \begin{matrix} L & \bar{v} & J_f \\ J_c & r & a \end{matrix} \right\} \quad (E.16)$$


schreiben läßt. Im Nenner steht hierbei der Hartree- Fock- Hamiltonoperator $\hat{H}_{HF}$. Gleichung (E.16) schreibt man besser in der Form

$$(\hat{H}_{HF} - \epsilon_v - \omega) |s'\rangle = - \sum_{L, s, J_c} |s\rangle G_L(r a, \bar{v} s) \delta_{s, J_f} \cdot (-)^{J_f - \bar{v} + L} \left\{ \begin{matrix} L & \bar{v} & J_f \\ J_c & r & a \end{matrix} \right\} \left(\frac{[J_c]}{[J_f]} \right)^{1/2} \quad (E.17)$$

Auf der rechten Seite steht eine vollständige Eins, nämlich

$$\sum_s |s\rangle \langle s| = \mathbb{1} \quad (E.18)$$

so daß man Gleichung (E.15) auch ersetzen kann durch

$$(\hat{H}_{HF} - \epsilon_v - \omega) |s'\rangle = \sum_{L, J_c} F_L^+(r a, \bar{v}) (-)^{J_f + \bar{v} + L} \cdot \left\{ \begin{matrix} L & \bar{v} & J_f \\ J_c & r & a \end{matrix} \right\} \left(\frac{[J_c]}{[J_f]} \right)^{1/2} \quad (E.19)$$

Mit $F_L^+(r a, \bar{v})$ aus Gleichung (2.245).

Im graphischen Iterationsschema entspricht Gleichung (E.15) dem ersten Term von Gleichung (2.236) und Gleichung (E.17) dem zweiten

Term von (2.233). Entsprechend den in Abschnitt II.5 getroffenen Konventionen ersetzen wir

$$\begin{array}{ll}
 a & \longrightarrow f_e \\
 r & \longrightarrow y_e^+ \\
 \bar{v} & \longrightarrow f_1 \\
 s & \longrightarrow y_1
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c}
 \bar{v} \\
 \uparrow \\
 \uparrow \\
 \uparrow \\
 s
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \nearrow r \\
 \searrow a
 \end{array}
 \quad (E.20)$$

und weiterhin

$$\begin{array}{ll}
 J_c & \longrightarrow L_e \\
 j_a & \longrightarrow j_e \\
 j_r & \longrightarrow \bar{j}_e \\
 j_{\bar{v}} & \longrightarrow j_1 = J_i
 \end{array}
 \quad (E.21)$$

Gleichung (E.19) liefert dann den Beitrag

$$(\hat{H}_{HP} - \epsilon_1 - \omega) y_{f_1} = \sum_{\ell, L_e} \sum_L (-)^{L+J_i+J_f} \cdot$$

$$\left(\frac{[L_e]}{[J_i]} \right)^{1/2} \left\{ \begin{array}{ccc} J_i & L & J_f \\ \bar{j}_e & L_e & j_e \end{array} \right\} F_L^+(y_e^+ f_e, f_1)
 \quad (E.22)$$

Dies ist gerade der erste Term in Gleichung (2.242). Man beachte, daß wir in Gleichung (E.22) noch über alle berücksichtigten Teilchen-Loch- Paare summiert haben.

In analoger Weise erhält man alle anderen Terme der RPA- Gleichungen.

LITERATURANGABEN :

- Al81 : I.S.Altarev et al. PL102B(1981)13
Ba79 : V.Baluni PRD19(1979)2227
BB73 : P.S.Bagus und J.Bauche PRA8(1973)734
BJD64: J.D.Bjorken und S.D.Drell : "Relativistic Quantum Mechanics"
McGraw-Hill 1964
Bou82: M.A.Bouchiat, J.Guena, L.Hunter und L.Pottier PL117B(1982)358
Bou84a:M.A.Bouchiat, J.Guena, L.Hunter und L.Pottier PL134B(1984)463
Bou84b:M.A.Bouchiat Scientific American June 1984 , p.76
BP83 : C.Bouchiat und C.A.Piketty Phys.Lett.128B(1983)73;
Nucl.Phys.221B(1983)68
Ca68 : J.P.Carrico et al. PR174(1968)125
Ch82 : J.Chakrabarti, S.Klara und L.P.S.Singh PL109B(1982)493
Ch65 : J.H.Christenson et al. PRL13(1964)138
Co80 : E.D.Commins und P.H.Bucksbaum Ann.Rev.Nucl.Part.Sci.30(1980)1
Da81 : B.P.Das Dissertation 1981 University of New York at Albany
DaB82: Particle Properties Data Booklet 1982
DG75 : T.De Grant, R.L.Jaffe, K.Johnson und J.Kiskis PRD12(1975)2060
Di71 : M.Danos und V.Gillet Ann.Phys63(1971)319
Di81 : M.Dine, W.Fishler und M.Srednicki PL104B(1981)199
DF65 : F.Dönau und G.Flach Nucl.Phys.69(1965)68
Dz84 : V.A.Dzuba et al. Phys.Lett.103A(1984)265
EB67 : El-Baz et al. Rev.Mod.Phys.39(1967)288
EG76 : J.M.Eisenberg und W.Greiner : "Nuclear Theory"
North- Holland 1976
En74 : R.Engfer et al. Atomic Data & Nuclear Data Tables
14(1974)509
Ga82a: M.B.Gavela et al. PL109B(1982)215
Ga82b: M.B.Gavela und H.Georgi PL119B(1982)141
Ge74 : H.Georgi und S.L.Glashow PRL32(1974)438
G161 : S.L.Glashow Nucl.Phys.22(1961)579
Go70 : H.Gould PRL24(1970)1091
Go84 : H.Gould erscheint in Nucl.Instr.Meth.
Gr80 : I.P.Grant et al. Comp.Phys.Comm.21(1980)207 und 233

Ha83 : W.C.Haxton und E.M.Henley PRL51(1983)1937
 Hu82 : K.Huang : "Quarks, Leptons and Gauge Fields"
 world scientific publishers 1982
 IZ80 : C.Itzykson und J.-B.Zuber : "Quantum Field Theory"
 McGraw-Hill 1980
 Ja75 : J.D.Jackson : "Classical Electrodynamics" Wiley&Sons 1975
 Jo79 : W.R.Johnson und C.D.Lin PRA20(1979)964
 Jo83 : W.R.Johnson und G.Soff PRL50(1983)1361
 Jo83 : W.R.Johnson persönliche Mitteilung
 Kr82 : I.B.Khriplovich und A.R.Zhitnitsky PL109B(1982)490
 LM82 : I.Lindgren und J.Morrison : "Atomic Many-Body Theory"
 Springer 1982
 Lo75 : C.E.Loving und P.G.H.Sandars J.Phys.88(1975)L336
 Ma84 : A.M.Martensson- Pendrill : Ninth International Conference
 on Atomic Physics ; Seattle 1984
 Na79 : D.V.Nanopoulos et al.PL87B(1979)53
 Ne77 : D.V.Neuffer und E.D.Commins PRA16(1977)844
 No73 : D.Nocross PRA7(1973)606
 Pa80 : H.Pagels und S.Stokar PRD22(1980)2876
 PQ77 : R.D.Peccei und H.R.Quinn PRL38(1977)1440
 Ro55 : M.E.Rose : "Multipole Fields" Wiley&Sons 1955
 Ro59 : M.Rotenberg et al. "The 3j and 6j Symbols"
 The Technology Press Cambridge MA 1959
 Ro61 : M.E.Rose : "Relativistic Electron Theory" Wiley&Sons 1961
 Sa77 : P.G.H.Sandars J.Phys.10B(1977)2983
 Sl64 : A.Salam und J.C.Ward PL13(1964)168
 Sa58 : E.E.Salpeter PR112(1958)1624
 SG75 : L.F.Shampine und M.K.Gordon : "Computer Solutions
 of Ordinary Differential Equations" Freeman 1975
 SS75 : P.G.H.Sandars und R.M.Sternheimer PRA11(1975)473
 Str69: R.F.Streater und A.S.Wightman : "PCT, Spin and Statistics,
 and all that" Benjamin-Cummings 1964
 Th82 : A.W.Thomas : "Chiral Symmetry and the Bag-Model"
 CERN preprint TH-3368
 UA83 : UA1-Kollaboration PL129B(1983)130; PL129B(1983)273
 Vo84 : T.G.Vold et al.PRL52(1984)2229

We67 : S.Weinberg PRL19(1967)1264
We76 : S.Weinberg PRL37(1976)657
We79 : S.Weinberg PRL43(1979)1566
Wh81 : J.F.Wheater Phys.Lett.105B(1981)483
Wu57 : Wu et al. PR105(1957)1413
Yu62 : Yutsis, Levinson und Vanagas : "Mathematical
Apparatus of the Theory of Angular Momentum"
Jerusalem 1962

Meine akademischen Lehrer waren :

Prof.Dr.K.Bethge,	Prof.Dr.F.Constantinescu,	Prof.Dr.T.Elze,
Priv.-Doz. Dr. H.J.Fink,	Prof.Dr.U.Gerhard,	Prof.Dr.W.Greiner,
Prof.Dr.H.Haug,	Prof.Dr.R.Jelitto,	Prof.Dr.R.Kultze,
Prof.Dr.J.Kummer,	Prof.Dr.W.Martienssen,	Prof.Dr.J.Maruhn,
Prof.Dr.G.Mauck,	Prof.Dr.E.Mohler,	Prof.Dr.B.Müller,
Prof.Dr.J.Rafelski,	Prof.Dr.F.Rauch,	Prof.Dr.M.Reichert,
Dr.J.Reinhardt,	Prof.Dr.H.Roesky,	Prof.Dr.A.Schaarschmidt,
Dr.U.Schröder,	Prof.Dr.W.Schwarz,	Priv.-Doz.Dr.G.Soff,
Prof.Dr.K.Stelzer,	Prof.Dr.F.Wächter.	

DANKSAGUNG :

An erster Stelle möchte ich Prof.Dr.W.Greiner für meine physikalische Ausbildung danken. Ich bin mir bewußt, daß ich durch sein Verdienst unter geradezu idealen Bedingungen studieren konnte.

Prof.Dr.B.Müller danke ich für seine wissenschaftliche Betreuung bei der Anfertigung dieser Arbeit.

Außerdem danke ich Prof.Dr.W.Johnson und Priv.-Doz Dr.G.Soff für die Einführung in viele der verwendeten atomphysikalischen Techniken. Ohne ihre Hilfe wäre diese Arbeit nicht zustandegekommen. Ebenso gilt mein Dank P.Schlüter, D.Vasak und K.H.Wietschorke für viele hilfreiche Diskussionen.

Schließlich danke ich Frau Utschig für die Anfertigung der Figuren und Herrn Holzmann für den sauberen Druck der Arbeit.

Der GSI - Darmstadt sei für die zur Verfügung gestellten Rechenzeit gedankt.

LEBENS LAUF :

Ich wurde am 2.9.1957 als Sohn des Dipl.-Ingenieurs Eugen Schäfer und seiner Frau Gisela in Frankfurt am Main geboren. Kurz darauf zogen meine Eltern nach Hofheim am Taunus, wo ich bis 1983 wohnte. Dort besuchte ich die Volksschule und das Main-Taunus-Gymnasium, an dem ich 1976 mein Abitur ablegte. Im selben Jahr begann ich mein Physikstudium an der Johann-Wolfgang-Goethe Universität in Frankfurt. 1981 bestand ich hier die Diplomhauptprüfung und bin seitdem im Fachbereich Physik als wissenschaftlicher Angestellter tätig. Seit 1983 bin ich verheiratet und wohne in Frankfurt.

